Mikroskopische Theorie der verallgemeinerten optischen Konstanten begrenzter Medien

DISSERTATION

zur

Erlangung des Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

der

Abteilung für Physik
und Astronomie

an der Ruhr-Universität Bochum

von

Christoph Heger

geb. in

Berlin

Bochum 1975

Mikroskopische Theorie der verallgemeinerten optischen Konstanten begrenzter Medien

DISSERTATION

zur

Erlangung des Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

der

Abteilung für Physik
und Astronomie

an der Ruhr-Universität Bochum

von

Christoph Heger

geb. in

Berlin

Bochum 1975

Dissertation eingereicht am 9.6.1975
Tag der mündlichen Prüfung 9.7.1975
Referent ..... Prof. Dr. D. Wagner
Korreferent ..... Prof. Dr. K. Elsässer

Herrn Prof. Dr. D. Wagner danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und seine Unterstützung bei ihrer Durchführung.

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Inhaltsverzeichnis

			Seite
		Einleitung	I
I.		Strikte Definition der elektromagnetischen Reflexions- und Transmissionskoeffizienten	1
	1.	Die elektromagnetischen Gln.	2
	2.	Die Felder im Außenraum	5
	3.	Reflexions- und Transmissionskoeffizienten (RTK)	7
	4.	Einfachste Hochfrequenz-Näherung	14
	5.	Der Energiefluß im Außenraum (Definitheits-Aussagen)	15
	6.	Das analytische Verhalten der RTK	20
	7.	Symmetrie-Aussagen	26
II.	8.	Reflexion- und Transmission "in erster Ordnung"	32
	9.	Energie-Bilanz (Definitheits-Aussagen)	35
	10.	Symmetrie-Aussagen	36
III.		Oberflächen-Impedanzen	39
	11.	Strikte Definition der Oberflächen-Impedanz	39
	12.	Der Energiefluß in die Schicht (Definitheits-Aussagen)	45
	13.	Das analytische Verhalten der Oberflächen-Impedanzen	47
	14.	Symmetrie-Aussagen	50
	15.	Übergang zur Punktgruppe der kontinuierlichen Schicht	52
IV.	16.	Die RTK und Volumen-Moden, Definition der Schichtanregungen (Oberflächen-Anregungen)	53
	17.	Ein Beispiel: 1. Das analytische Verhalten	57

			Seite
		2. Bestimmung der Anregungen der Schicht	61
	18.	Die Methode der geschwächten Totalreflexion(ATR)	63
V.		Dynamik des Elektronen-Strahlungsfeld-Systems	67
	19.	Der Hamilton-Operator des Systems	67
	20.	Die Green-Funktionen	70
	21.	Bewegungsgln. für die niedrigsten Green-Funktionen	73
	22.	Legendre-Transformation (U_{10}, U_{40}, U_{04}) $\rightleftharpoons$ (G^{τ}_{10}, G^{τ}_{40}, G_{04})	75
	23.	Einführung und Bestimmung von Hilfsfunktionen (Vertices etc.)	79
	24.	Die Stromdichte-Korrelationsfunktionen	83
	25.	Das Entkopplungsverfahren	87
	26.	Eine Vereinfachung in der RPA	101
	27.	Störungsrechnung für Korrekturen $\delta\tilde{Q}_{40}$ bzw. δQ^{τ}_{40}	105
VI.		Das einkomponentige Modell. Ein Vergleich	106
	28.	RPA-Stromdichte-Korrelationsfunktionen	106
	29.	Diskussion des einkomponentigen Systems	109
	30.	Ein näherungsunabhängiger Mangel des vereinfachten Modells	115
VII.		Das Modell der strikten ebenen Oberflächen	117
	31.	Bestimmung der Stromkorrelationsfunktionen	117
	32.	Bestimmung der RTK	123
	33.	Diskussion der Ergebnisse	125
	34.	Auswertungen und Vergleiche	127

Seite

VIII. 35. Störungsrechnung für Korrekturen $\delta\tilde{Q}_{10}$ 140

36. Reflexion an einer einfachen Modell-Oberfläche 154

Zusammenfassung 156

Anhang 160

Literaturverzeichnis 161

Einleitung

Für die Transporterscheinungen im bulk-Material existiert seit langem eine leistungsfähige mikroskopische Theorie: Bei Beschränkung auf die (semi-) klassische Näherung steht seit einem Jahrhundert die Boltzmanngl. zur Verfügung, für die quantenmechanische Behandlung von Gleichgewichts- und Ungleichgewichts-Problemen hat man in den Green-Funktions-Methoden[27] ein geeignetes Instrument. Speziell die aus der linearisierten Boltzmann (-Vlasov)-Gl. gewonnenen Leitfähigkeiten oder die aus der linearen Respons-Theorie[3] zu erhaltenden Strom- und Ladungsdichte-Korrelationsfunktionen erlauben in Verbindung mit den Maxwellschen Gln. der Elektrodynamik die Beschreibung der (im weitesten Sinne) optischen Erscheinungen im bulk-Material.

Insofern das letztere als homogenes Medium angesehen wird, sind alle linearen Respons-Beziehungen vom Faltungstyp

$$j_\mu(x\omega) = \int d^3x' \sigma_{\mu\nu}(x-x',\omega) E_\nu(x'\omega) \qquad (1)$$

bzw. nach Fourier-Transformation rein algebraisch

$$j_\mu(q\omega) = \sigma_{\mu\nu}(q\omega) E_\nu(q\omega). \qquad (1')$$

Die "Reichweite" von $\sigma_{\mu\nu}(x-x',\omega)$ um einen Aufpunkt x ist der Größe nach etwa durch die freie Weglänge ($\sim |v_F\tau/(1-i\omega\tau)|$) bzw. den Zyklotron-Radius ($\sim v_F/\omega_c$) gegeben, die Länge der Strecke, längs der $E_\nu(x'\omega)$ merklich variiert ("Variationslänge"), durch Wellen- bzw. Abklinglänge. Ist diese sehr viel größer als die erstere Größe, genügt die "lokale Näherung":

$$j_\mu(x\omega) = \sigma_{\mu\nu}(\omega) E_\nu(x\omega) \qquad (2)$$

$$j_\mu(q\omega) = \sigma_{\mu\nu}(\omega) E_\nu(q\omega) \qquad (2')$$

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) := \sigma_{\mu\nu}(q=0\omega) \qquad (3).$$

Ein Gegenbeispiel hat man in den Zyklotron-Wellen, wie sie von Walsh und Platzman (1965)[58] im Elektronen-Plasma von K nachgewiesen worden sind; deren Propagation - quer zum angelegten Magnetfeld - an der Nicht-Lokalität von $\sigma_{\mu\nu}(q\omega)$ hängt. Auch das Phänomen der optischen Aktivität ist in der Nicht-Lokalität des Zusammenhangs von Stromdichte und Feld begründet. Das physik-historische Beispiel für die Nicht-Lokalität ist jedoch der "anomale Skin-Effekt" (s.w.u.); allerdings tritt hier zu dem Problem des integralen Zusammenhangs von $j_\mu(\mp)$ und $E_\nu(\mp')$ das Problem der Beschreibung des Randes komplizierend hinzu.

Für solche Probleme "inhomogener Medien" läßt sich die "lokale Näherung" Gl. (2) leicht verallgemeinern durch

$$j_\mu(\mp\omega) = \sigma_{\mu\nu}(\omega;\mp)\, E_\nu(\mp\omega) \qquad (4)$$

mit einer für das an der Stelle $\mp$ befindliche Medium gültigen lokalen Leitfähigkeit. Gl. (4) verlangt offenbar ein schwach inhomogenes Medium - gemessen an der Variationslänge des elektrischen Feldes - eine Bedingung, die im Inneren der betrachteten Medien (Metalle) erfüllt ist, aber durchaus nicht auf dem Rande: Die Strecke, auf der die Elektronendichte von Metallen von $n_0 \approx 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$ auf 0 abfällt, ist etwa $1/k_{TF} \approx 10^{-8}\,\mathrm{cm}$. Gerade diese minimale Tiefe der Inhomogenitätsschicht nutzt jedoch die lokale Theorie: Die aneinandergrenzenden Medien werden durch (zwei) "Materialgrößen" $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ und die Randschicht wie eine mathematische Oberfläche durch die bekannten Randbedingungen für das elektromagnetische Feld erfaßt. Sie gibt für einen metallischen Halbraum der Leitfähigkeit $\sigma(\omega) = \omega_p^2\tau/(1-i\omega\tau) \approx \omega_p^2\tau$ bei senkrecht auf die (ebene) Oberfläche eingestrahltem Feld die Oberflächen-Impedanz (nach Gl. (35.4))

$$Z(\omega) = (1-\sigma(\omega)/i\omega)^{-1/2} \approx (-\sigma(\omega)/i\omega)^{-1/2} = \sqrt{\omega/2\sigma(\omega)}\; - i\sqrt{\omega/2\sigma(\omega)} \qquad (5)$$

(normaler Skineffekt).

Die Beobachtung des anomalen Skin-Effekts war nun (London 1940), daß für reines Sn bei 4 K bei Radio-Frequenz-Einstrahlung ($\omega \approx 10^6 s^{-1}$) der Oberflächen-Widerstand $R \propto Re\{Z(\omega)\}$ viel größer ist, als durch Gl. (5) angegeben, und für große Leitfähigkeiten unabhängig von σ wird (Pippard 1947). Schon London vermutete im Zusammenbruch des Ohmschen Gesetzes, Gl. (2), die Erklärung. In der Tat erreicht man in solchen Experimenten freie Weglängen von bis zu 0,2 cm, verglichen mit einer Skin-Tiefe $\delta \approx c/\omega(ImZ)$: etwa 10^{-6} - 10^{-5} cm. Diese Situation schließt den Übergang von Gl. (1) zu Gl. (2), also die lokale Näherung, aus.

Noch nicht wesentlich geändert hat sich die physikalische Situation hinsichtlich der Inhomogenität des Mediums: Die Dicke der Übergangsschicht ist immer noch 100 bis 1000 mal kleiner als die Skin-Tiefe, so daß die beteiligten Elektronen "fast immer" ein ungestörtes (bulk-)Medium "sehen". Demzufolge wird bei der Diskussion des anomalen Skin-Effekts erfolgreich mit den Eigenschaften der Fermi-Fläche des ungestörten Metalls argumentiert. Der Effekt sondiert bulk-Eigenschaften und ist wenig von den Randbedingungen abhängig, in denen die Physik der Randschicht grob erfaßt wird.[59]

Die Situation ändert sich, wenn eine weitere Länge mit der Dicke der Übergangsschicht in Konkurrenz tritt: die Eindring-Tiefe von Oberflächen-Polaritonen. Diese liegt für das Oberflächen-Plasmon je nach Wellenlänge bei 10^{-6} cm ja sogar 10^{-7} cm (sie wird in der lokalen Theorie durch 0 genähert), so daß die Dicke der Übergangsschicht schon einige Prozent davon ausmacht.

Es besteht mithin das Bedürfnis nach einer mikroskopischen Theorie der Elektrodynamik (Optik) begrenzter Medien (Metalle). Das einfachste Beispiel sei die unendlich ausgebreitete ebene Schicht. Diese Theorie soll in ihrem formalen Teil völlig allgemein und ohne Rekurs auf willkürliche Modelle, wie das einer scharfen Oberfläche, aber in ökonomischer Weise an die Fragestellung angepaßt konzipiert werden.

Gefragt ist nach der elektrodynamischen ("optischen") Wirkung des begrenzten Mediums auf den der Messung zugänglichen "Außenraum". Hier genüge die Beschränkung auf "lineare Phänomene": Die elektromagnetischen Felder, die das Gleichgewicht des betrachteten Systems stören, seien so schwach, daß sie nur in linearer Näherung berücksichtigt werden müssen. In der Amplitude dieser Felder quadratische Effekte wie z.B. die (Raman-) Lichtstreuung bleiben außer Betracht. Dann wird jene (im weitesten Sinne) optische Wirkung erfaßt durch die 16 (linearen) Reflexions- und Transmissionskoeffizienten oder alternativ durch die Oberflächen-Impedanzen des betrachteten Systems (Abschnitte 3 und 8 bzw. 11). Sie enthalten alle relevante Information; speziell enthalten sie die gesamte Phänomenologie der Oberflächen-Polaritonen in völliger Allgemeinheit (Abschnitt 16). Willkürliche Modelle für die "Oberfläche" sind dabei ersetzt worden durch eine Betrachtung der Asymptotik der Felder "weit außerhalb" des Mediums.

Der hier erstmals aufgewiesene Zusammenhang dieser phänomenologischen Größen mit der mikroskopischen Theorie ist trotz völliger Allgemeinheit denkbar direkt: Sie sind gegeben durch die Stromdichte-Korrelationsfunktionen (lineare Respons-Funktionen, Kubo-Formeln) des (inhomogenen) Systems (Abschnitte 3 und 8). Dieser Zusammenhang erlaubt es, den Effekt der

Symmetrien des Mediums - bzw. ihrer Aufhebung durch ein statisches Magnetfeld - auf die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten systematisch zu verfolgen und deren analytisches Verhalten zu diskutieren.

In einem zweiten Teil wird die Dynamik des reflektierenden und transmittierenden Mediums spezifiziert als eines (zweikomponentigen) Systems von Photonen und Coulombisch wechselwirkenden Elektronen vor einem starren Ionen-Potential (Kap. V). Ohne daß dieser Punkt im weiteren erörtert würde, sei betont, daß die für den anomalen Skin-Effekt oder die Zyklotron-Resonanz so wichtigen Bandstruktur-Effekte berücksichtigt oder vernachlässigt werden je nach Wahl eines periodischen Ionenpotentials oder eines ausgeschmierten positiven Hintergrunds. Die Dynamik dieses Systems wird erfaßt durch ein (endliches) System von Funktionalgln. (Abschnitt 22), formuliert mit gewissen Hilfsfunktionen (Vertices, Wechselwirkungen etc., Abschnitt 23). Von diesen geht als einzige die "Photon-Selbstenergie" Q^{T}_{∞} explizit ein in die Bestimmung der Stromdichtekorrelationsfunktion nach Gl. (24.15). Für sie hat man Näherungen zu konzipieren. Dazu wird für jenes System eine RPA hergeleitet, wobei eine v_F/c-Entwicklung (formal: eine e/c-Entwicklung) bis zur zweiten Ordnung i m R e s p o n s d e s S y s t e m s durchgeführt wird (Abschnitt 25). Diese RPA stellt in einfacher Weise die Verbindung mit der (semi-)klassischen Boltzmann-Gleichungs-Behandlung her (Abschnitt 26). Zum Vergleich wird ein anderes, zuweilen vorgeschlagenes[31] dynamisches Modell diskutiert: ein System von Elektronen vor starrem Ionen-Potential, die gemäß der Breitschen Wechselwirkung miteinander wechselwirken. Es führt zu irrigen Konsequenzen (Abschnitte 29 und 30).

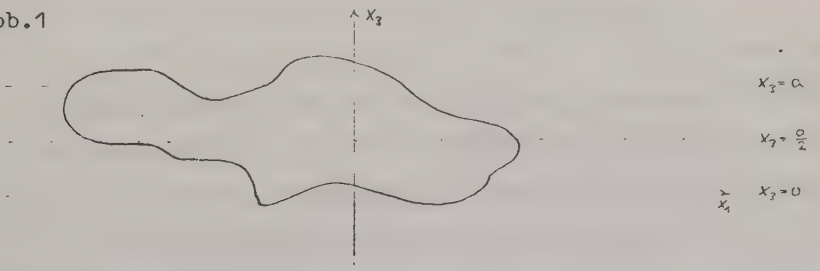
Um an ältere Modell-Rechnungen anschließen zu können, wird in einem dritten Teil das Modell der "strikten Oberfläche" diskutiert (Kap. VII). Es ist dieses Modell, in dem die Oberflächen-Impedanzen gegenüber den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten auf einmal als die primären Größen erscheinen. Korrekturen an diesem Modell können in Störungsrechnung 1. Ordnung berücksichtigt werden (Abschnitt 35 i.V. mit 26). Die in diesem Teil enthaltenen expliziten Auswertungen mögen als Exempel dienen. Denn es soll hier nicht auf eine spezielle zahlenmäßige Aussage ankommen sondern auf die ökonomische Erfassung des breiten Spektrums der (magneto-) "optischen" Erscheinungen durch "verallgemeinerte optische Konstanten" (d.h. den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten) und ihrer Verknüpfung mit der Dynamik eines endlich ausgedehnten Systems Coulombisch und durch Austausch transversaler Photonen wechselwirkender Elektronen in einer konsequent mikroskopischen Theorie.

I. Strikte Definition der elektromagnetischen Reflexions- und Transmissionskoeffizienten

Um sich von willkürlichen Annahmen über die Lage oder überhaupt die Existenz einer reflektierenden scharfen "Oberfläche" etc. freizumachen, sollte man die Definition der elektromagnetischen Reflexions- und Transmissionskoeffizienten - wie in der Streutheorie - aus der Betrachtung der "asymptotischen Bereiche" und der dort herrschenden, leichter zu überschauenden Felder ziehen.

Dazu betrachte man ein Teilchen-System, von dem zunächst nur verlangt wird, daß es in einer Richtung, der x_3-Richtung, wenn schon nicht strikt begrenzt, so doch in einer zu präzisierenden Weise "endlich" ist.

Abb.1



Falls das System in strikte Grenzen eingeschlossen ist, sollen sie bei $x_3 = 0$ und $x_3 = a$ liegend gedacht werden. Ansonsten sollen diese Ebenen nur ungefähr die Lage des Systems angeben: Über diese Grenzen soll die Teilchendichte des Systems vielleicht etwas fluktuieren aber nicht "wesentlich" hinausreichen. Insbesondere soll natürlich eine etwaige Spiegelebene des Systems senkrecht zur x_3-Achse bei $x_3 = a/2$ liegen. Trotz ihrer willkürlichen Wahl ist

es nützlich, die Ebenen $x_3 = 0$ und $x_3 = a$ in Ermangelung wirklicher Oberflächen des Systems als "Ersatz-Oberflächen" anzusehen.

1. Die elektromagnetischen Gleichungen

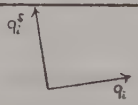
Die elektromagnetischen Felder und Ströme sollen in "gemischter Darstellung", $\mathcal{E}_\mu(q_1 q_2 x_3 \omega)$ etc, geschrieben werden, ohne daß dabei gleich an eine Entartung des vorgestellten Systems zu einem in x_1- und x_2-Richtung translationsinvariantem System gedacht wird. Es ist weiterhin sinnvoll, statt der auf irgendein körperfestes Achsensystem bezogenen Komponenten $\mathcal{E}_1(q_1 q_2 x_3 \omega)$ und $\mathcal{E}_2(q_1 q_2 x_3 \omega)$ etc. die Komponenten

$$\mathcal{E}_p(q_1 q_2 x_3 \omega) := q_i/q_n \, \mathcal{E}_i(q_1 q_2 x_3 \omega) \qquad (i = 1,2)$$

$$\mathcal{E}_s(q_1 q_2 x_3 \omega) := q_i^s/q_n \, \mathcal{E}_i(q_1 q_2 x_3 \omega)$$

parallel bzw. senkrecht zum Vektor (q_1, q_2) zu verwenden. Dabei ist $q_n := \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$ und $q_i^s := (-q_2, q_1)$. Diese Wahl des Koordinatensystems in der x_1, x_2-Ebene ist besonders vorteilhaft für die später anstehende Diskussion, welchen Einfluß die ebenen Symmetrien einer Kristallschicht auf die Reflexion und Transmission haben. Man beachte, daß zu $\mathcal{E}_p$ longitudinale und transversale Feld-Anteile beitragen, zu $\mathcal{E}_s$ nur transversale.

---

*) Die Lage der Vektoren ist 

, so daß "p,s,3" wieder ein Rechtssystem ist.

Folgendes System von Gln. ist dann eine äquivalente Umformung der Maxwellschen Gln. ($\lambda^2 := \omega^2/c^2 - q_\parallel^2$)

$$(\lambda^2 + d^2/dx_3^2)\,\mathcal{E}_p(q_1q_2x_3\omega) = 1/i\omega\{\lambda^2 j_p(q_1q_2x_3\omega) + q_\parallel\, i\,d/dx_3\, j_3(q_1q_2x_3\omega)\}$$

$$-i\,d/dx_3\, q_\parallel \mathcal{E}_p(q_1q_2x_3\omega) + \lambda^2 \mathcal{E}_3(q_1q_2x_3\omega) = -i\omega/c^2 j_3(q_1q_2x_3\omega)$$

$$-i\,d/dx_3\, \mathcal{E}_p(q_1q_2x_3\omega) - q_\parallel\, \mathcal{E}_3(q_1q_2x_3\omega) = \omega/c\, \mathcal{B}_s(q_1q_2x_3\omega)$$

$$q_\parallel j_p(q_1q_2x_3\omega) - i\,d/dx_3\, j_3(q_1q_2x_3\omega) = \omega\rho(q_1q_2x_3\omega)$$

$$(\lambda^2 + d^2/dx_3^2)\,\mathcal{E}_s(q_1q_2x_3\omega) = -i\omega/c^2\, j_s(q_1q_2x_3\omega)$$

$$-i\,d/dx_3\, \mathcal{E}_s(q_1q_2x_3\omega) = -\omega/c\, \mathcal{B}_p(q_1q_2x_3\omega)$$

$$-q_\parallel \mathcal{E}_s(q_1q_2x_3\omega) = -\omega/c\, \mathcal{B}_3(q_1q_2x_3\omega) \qquad (1.1a\text{-}g)$$

Die Stromdichten $j_r(q_1q_2x_3\omega)$ werden dabei als von gewissen externen, sogenannten "angewandten" Feldern induziert vorgestellt. Letztere sind als Lösungen der homogenen Maxwellschen Gln. von folgender Form ($\lambda \neq 0$):

$$\mathcal{E}_p^{ext}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} + \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{-i\lambda x_3} \qquad *)$$

$$\mathcal{E}_s^{ext}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} + \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{E}_3^{ext}(q_1q_2x_3\omega) = -q_\parallel/\lambda\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} + q_\parallel/\lambda\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{-i\lambda x_3} \qquad (1.2a\text{-}c)$$

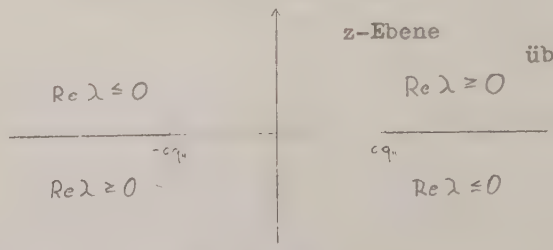
Sie sind also gegeben durch vier unabhängige Konstanten (i.e. Funktionen von q_1, q_2, ω). Diese Wahl eines externen Feldes entsprechend einer zweiseitigen Einstrahlung empfiehlt sich nicht nur durch mathematische Vorzüge und Vorteile in der Darlegung; sie entspricht auch der tatsächlichen Situation in vielen Experimenten wie z.B. sog. "two-sided reflection experiments" zur Bestimmung des Spektrums der Zyklotron-Wellen in Metallen.[1]

---

*) Wegen der Realität der Felder in Orts-Zeit-Darstellung muß gelten: $\mathcal{E}_{p/s}^{(i)}(q_1q_2\omega)^* = -\mathcal{E}_{p/s}^{(i)}(-q_1-q_2-\omega)$.

Dabei ist - wie im folgenden immer - λ folgender Zweig der in der z-Ebene zweideutigen Funktion $\sqrt{(z/c)^2-q_\perp^2}$ *)

Abb.2



Auf diese Weise ist gewährleistet, daß für $|\omega| > c\,q_\perp$

$$\mathcal{E}^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\; e^{i(\lambda x_3 - \omega t)}$$

eine von $x_3 = -\infty$ hereinlaufende und

$$\mathcal{E}^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\; e^{-i(\lambda(x_3 - a) - \omega t)}$$

eine von $x_3 = \infty$ hereinlaufende Welle ist. Die Phase ist dabei so gewählt, daß die (komplexen) Amplituden $\mathcal{E}^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$ und $\mathcal{E}^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$ zugleich die Amplituden auf den "Ersatz-Oberflächen" $x_3 = 0$ bzw. $x_3 = a$ sind. Für $-cq_\perp < \omega < cq_\perp$ ist analog

$$\mathcal{E}^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\; e^{i(\lambda x_3 - \omega t)}$$

ein zeitlich oszillierendes bei $x_3 = -\infty$ lokalisiertes Feld, das das betrachtete System nur mit exponentiell abklingenden Schwänzen erreicht.

$$\mathcal{E}^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\; e^{-i(\lambda(x_3 - a) - \omega t)}$$

ist ein solches bei $x_3 = \infty$ lokalisiertes Feld. Wieder sind die $\mathcal{E}^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$ und $\mathcal{E}^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$ die Amplituden auf den Ersatz-Oberflächen.

---

*) Die Verzweigungspunkte $z = \pm\, cq_\perp$ entsprechen "streifender" Inzidenz der angewandten Felder. Dieser Fall wird immer ausgeschlossen im Verlauf der Überlegungen und erst in den Ergebnissen als Limes wiedergewonnen.

Um die Ausdrucksweise knapp zu halten, sollen auch die letzteren, im wesentlichen elektrostatischen, Felder einfach "von $x_3 = -\infty$ einlaufend" bzw. "von $x_3 = +\infty$ einlaufend" heißen.

Die Gln.(1.1a-d u. e-g) lassen sich nun nach $\mathcal{E}_p(q_1 q_2 x_3 \omega)$ bzw. $\mathcal{E}_s(q_1 q_2 x_3 \omega)$ auflösen:

$$\mathcal{E}_p(q_1 q_2 x_3 \omega) = (c_1^p - c\lambda/\omega \cdot 1/2c \int_{-\infty}^{x_3} dx_3' \{ j_p(q_1 q_2 x_3' \omega) - q_\parallel/\lambda j_3(q_1 q_2 x_3' \omega) \} e^{-i\lambda x_3'}) e^{i\lambda x_3}$$
$$+ (c_2^p - c\lambda/\omega \cdot 1/2c \int_{x_3}^{\infty} dx_3' \{ j_p(q_1 q_2 x_3' \omega) + q_\parallel/\lambda j_3(q_1 q_2 x_3' \omega) \} e^{i\lambda x_3'}) e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{E}_s(q_1 q_2 x_3 \omega) = (c_1^s - \omega/c\lambda \cdot 1/2c \int_{-\infty}^{x_3} dx_3' j_s(q_1 q_2 x_3' \omega) e^{-i\lambda x_3'}) e^{i\lambda x_3}$$
$$+ (c_2^s - \omega/c\lambda \cdot 1/2c \int_{x_3}^{\infty} dx_3' j_s(q_1 q_2 x_3' \omega) e^{i\lambda x_3'}) e^{-i\lambda x_3} \qquad (1.3a\text{-}b)$$

2. Die Felder im Außenraum

Das betrachtet System soll nun in dem folgenden Sinne "endlich" in der x_3-Richtung sein: für $x_3 \to \pm\infty$ soll das System so schnell in Vakuum übergehen, daß dort die Ladungsdichte $\varrho(q_1 q_2 x_3 \omega)$ und die Stromdichte $j_r(q_1 q_2 x_3 \omega)$ schneller gegen Null konvergieren als jede Exponentialfunktion $e^{\alpha x_3}$.

Diese Bedingung ist kaum übermäßig restriktiv. Sie garantiert aber, daß durch

$$j_r(q_1 q_2 q_3 \omega) := \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \, e^{-iq_3 x_3} j_r(q_1 q_2 x_3 \omega) \qquad (2.1)$$

eine in der komplexen q_3-Ebene ganze Funktion definiert wird. *)

---

*) Diese Funktion muß dann bei $q_3 = \infty$ eine wesentliche Singularität haben.

Es folgt für die Felder in den beiden asymptotischen Bereichen

1) $x_3 \to -\infty$

$$\mathcal{E}_P(q_1 q_2 x_3 \omega) \approx \mathcal{E}_P^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) := c_1^P e^{i\lambda x_3} + (c_2^P - c\lambda/\omega \cdot 1/2\, c\{j_P(q_1 q_2 - \lambda\omega) + q_n/\lambda j_3(q_1 q_2 - \lambda\omega)\}) e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{E}_S(q_1 q_2 x_3 \omega) \approx \mathcal{E}_S^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) := c_1^S e^{i\lambda x_3} + (c_2^S - \omega/c\lambda \cdot 1/2\, c\, j_S(q_1 q_2 - \lambda\omega)) e^{-i\lambda x_3}$$

2) $x_3 \to +\infty$

$$\mathcal{E}_P(q_1 q_2 x_3 \omega) \approx \mathcal{E}_P^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) := c_2^P e^{-i\lambda x_3} + (c_1^P - c\lambda/\omega \cdot 1/2\, c\{j_P(q_1 q_2 \lambda\omega) - q_n/\lambda j_3(q_1 q_2 \lambda\omega)\}) e^{i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{E}_S(q_1 q_2 x_3 \omega) \approx \mathcal{E}_S^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) := c_2^S e^{-i\lambda x_3} + (c_1^S - \omega/c\lambda \cdot 1/2\, c\, j_S(q_1 q_2 \lambda\omega)) e^{i\lambda x_3}$$

Die von $x_3 = -\infty$ und $x_3 = +\infty$ her einlaufenden Anteile der asymptotischen Felder $\mathcal{E}_{P/S}^{(1)}$ bzw. $\mathcal{E}_{P/S}^{(2)}$ müssen identifiziert werden mit den angewandten Feldern von Gl.(12a-c). Also ist gleichzusetzen:

$$c_1^P = \mathcal{E}_P^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} \qquad c_2^P = \mathcal{E}_P^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{i\lambda a}$$

$$c_1^S = \mathcal{E}_S^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} \qquad c_2^S = \mathcal{E}_S^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{i\lambda a}$$

Daher lauten die asymptotischen Felder in Abhängigkeit von diesen Eingabe-Größen

1) $x_3 \to -\infty$

$$\mathcal{E}_P^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_P^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} e^{i\lambda x_3} + (\mathcal{E}_P^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in} e^{i\lambda a} - c\lambda/\omega \cdot 1/2\, c\{j_P(q_1 q_2 - \lambda\omega) + q_n/\lambda j_3(q_1 q_2 - \lambda\omega)\}) e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{E}_S^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_S^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} e^{i\lambda x_3} + (\mathcal{E}_S^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in} e^{i\lambda a} - \omega/c\lambda \cdot 1/2\, c\, j_S(q_1 q_2 - \lambda\omega)) e^{-i\lambda x_3} \qquad (2.2a)$$

2) $x_3 \to +\infty$

$$\mathcal{E}_P^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_P^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3 - a)} + (\mathcal{E}_P^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} e^{i\lambda a} - c\lambda/\omega \cdot 1/2\, c \cdot e^{i\lambda a}\{j_P(q_1 q_2 \lambda\omega) - q_n/\lambda j_3(q_1 q_2 \lambda\omega)\}) e^{i\lambda(x_3 - a)}$$

$$\mathcal{E}_S^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_S^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3 - a)} + (\mathcal{E}_S^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} e^{i\lambda a} - \omega/c\lambda \cdot 1/2\, c \cdot e^{i\lambda a} j_S(q_1 q_2 \lambda\omega)) e^{i\lambda(x_3 - a)} \qquad (2.2b)$$

Sie sind zusammen mit den aus ihnen folgenden Feldern $\mathcal{E}_3^{(1/2)}$, $\mathcal{L}_S^{(1/2)}$ bzw. $\mathcal{L}_P^{(1/2)}$, $\mathcal{B}_3^{(1/2)}$ die "Felder im Außenraum" und, weil der Messung zugänglich, allein interessant.

Zwischenbemerkung: Volumen-Plasmonen

Man sieht sofort, daß die asymptotischen Felder nur von den transversalen Anteilen der Stromdichten abhängen - und zwar gleichgültig, ob $\omega^2 > c^2 q_\parallel^2$ oder $\omega^2 < c^2 q_\parallel^2$. Eine etwaige spontane, d.h. noch im Limes $\mathcal{E}_{in} \to 0$ nichtverschwindende Fluktuation der Ladungsdichte (also eine als rein longitudinal vorgestellte Fluktuation, "Volumen-Plasmon") kann sich folglich nicht durch elektromagnetische Felder "im Außenraum" bemerkbar machen[2], wohl allerdings durch geänderte Reflexions- und Transmissionskoeffizienten (s.u.).

3. Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten (RTK)

Die von den externen "angewandten" Feldern induzierten Ströme j_p, j_s, j_0 , in denen jetzt gemäß Gl. (2.2) die Physik der Reflexion und Transmission elektromagnetischer Felder durch das betrachtete System komprimiert ist, sollen approximativ als lineare Funktionen der externen Felder angesehen werden (lineare Responstheorie). Dazu müssen diese Felder als "schwach" angesehen werden. Experimente mit LASER, Raman-Lichtstreuung, überhaupt die nichtlineare Optik bleiben außerhalb des Gesichtskreises dieser Betrachtungen.

In dieser linearen Näherung müssen die (asymptotischen) Felder im Außenraum folgende Form haben:

1) $x_3 \to -\infty$

$$\mathcal{E}_p^{(1)}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} \qquad (3.1a\text{-}d)$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{R}_{(1)}^{pp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in} + \mathcal{R}_{(1)}^{ps}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{-i\lambda x_3}$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{T}_{(2)}^{pp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} + \mathcal{T}_{(2)}^{ps}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3}$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{R}_{(1)}^{sp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2')_{in} + \mathcal{R}_{(1)}^{ss}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{-i\lambda x_3}$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{T}_{(2)}^{sp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} + \mathcal{T}_{(2)}^{ss}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{-i\lambda x_3}$$

2) $x_3 \to +\infty$

$$\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3-a)}$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{R}_{(2)}^{pp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} + \mathcal{R}_{(2)}^{ps}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{i\lambda(x_3-a)}$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{T}_{(1)}^{pp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in} + \mathcal{T}_{(1)}^{ps}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{i\lambda(x_3-a)}$$

$$\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3-a)}$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{R}_{(2)}^{sp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} + \mathcal{R}_{(2)}^{ss}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{i\lambda(x_3-a)}$$
$$+ 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} \Big\{ \mathcal{T}_{(1)}^{sp}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in} + \mathcal{T}_{(1)}^{ss}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)\, \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in} \Big\} e^{i\lambda(x_3-a)}$$

Dabei sei L die Kantenlänge des (großen) Periodizitätsquadrats in der x_1,x_2-Ebene, in dem wie üblich das System liegend gedacht wird.

Der Vergleich mit Gl. (2.2) zeigt sofort, wie die so eingeführten (linearen) Reflexions- und Transmissionskoeffizienten (RTK) vermittels der Stromdichten gegeben sind, nämlich: *)

$$\mathcal{R}_{(1)}^{pp}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -c\lambda/\omega \cdot 1/2c \left\{ (\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} + q_1/\lambda (\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} \right\}$$
$$\mathcal{R}_{(1)}^{ps}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -c\lambda/\omega \cdot 1/2c \left\{ (\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} + q_1/\lambda (\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} \right\}$$
$$\mathcal{R}_{(1)}^{sp}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot (\delta j_s(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$
$$\mathcal{R}_{(1)}^{ss}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot (\delta j_s(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$

---

*) Die Variationsableitung sei so definiert, daß z.B. gilt:

$$j_p(q_1q_2-\lambda\omega) = 1/L^2 \sum_{q_1'q_2'} (\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1'q_2'\omega)_{in}$$
$$+ \text{(analoge Beiträge in } \mathcal{E}_s^{(1)}, \mathcal{E}_p^{(2)}, \mathcal{E}_s^{(2)})$$

$$\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -c\lambda/\omega\cdot 1/2c\left\{(\delta j_p(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} - q_1/\lambda(\delta j_3(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\right\}$$

$$\mathcal{R}^{ps}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2'\omega) = -c\lambda/\omega\cdot 1/2c\left\{(\delta j_p(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} - q_1/\lambda(\delta j_3(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\right\}$$

$$\mathcal{R}^{sp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\omega/c\lambda\cdot 1/2c\,(\delta j_s(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$

$$\mathcal{R}^{ss}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\omega/c\lambda\cdot 1/2c\,(\delta j_s(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$

und

$$\mathcal{T}^{pp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}e^{i\lambda a} - c\lambda/\omega\cdot 1/2c\left\{(\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_{in}(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} + q_1/\lambda(\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\right\}$$

$$\mathcal{T}^{ps}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -c\lambda/\omega\cdot 1/2c\left\{(\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} + q_1/\lambda(\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\right\}$$

$$\mathcal{T}^{sp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\omega/c\lambda\cdot 1/2c\cdot(\delta j_s(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$

$$\mathcal{T}^{ss}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}e^{i\lambda a} - \omega/c\lambda\cdot 1/2c\cdot(\delta j_s(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(2)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$

$$\mathcal{T}^{pp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}e^{i\lambda a} - c\lambda/\omega\cdot 1/2c\left\{(\delta j_p(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} - q_1/\lambda(\delta j_3(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\right\}$$

$$\mathcal{T}^{ps}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -c\lambda/\omega\cdot 1/2c\left\{(\delta j_p(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} - q_1/\lambda(\delta j_3(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\right\}$$

$$\mathcal{T}^{sp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\omega/c\lambda\cdot 1/2c\cdot(\delta j_s(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$

$$\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}e^{i\lambda a} - \omega/c\lambda\cdot 1/2c\cdot(\delta j_s(q_1q_2\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_s(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}$$

Führt man die Variationsableitungen nach der Kettenregel aus gemäß folgendem Muster

$$\mathcal{R}^{pp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -c\lambda/\omega\cdot 1/2c\left\{(\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0} + q_1/\lambda(\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)/\delta\mathcal{E}^{(1)}_p(q_1'q_2'\omega)_{in})_{\mathcal{E}_{in}=0}\right\}$$

$$= -\frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\left\{\int dx_3'\left[\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'x_3'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}e^{+i\lambda' x_3} - \left(\frac{\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_3(q_1'q_2'x_3'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}e^{+i\lambda' x_3'}\right]\right.$$

$$\left. + \frac{q_1'}{\lambda}\int dx_3'\left[\left(\frac{\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'x_3'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}e^{+i\lambda' x_3} - \left(\frac{\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_3(q_1'q_2'x_3'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}e^{+i\lambda' x_3'}\right]\right\}$$

$$= -\frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'+\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0} - \left(\frac{\delta j_p(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_3(q_1'q_2'+\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}\right.$$

$$\left. + \frac{q_1'}{\lambda}\left(\frac{\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'+\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0} - \frac{q_1'}{\lambda}\left(\frac{\delta j_3(q_1q_2-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_3(q_1'q_2'+\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}\right\},$$

so erhält man im einzelnen $\mathcal{R}^{pp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega)$ wie gerade bestimmt und

$$\mathcal{R}^{ps}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\frac{q_1}{\lambda}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\right\}$$

$$\mathcal{R}^{sp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\left\{\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}\right\}$$

$$\mathcal{R}^{ss}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}$$

$$\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{c}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,-\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\cdot\frac{q_1'}{\lambda'}\right.$$
$$\left.-\frac{q_1}{\lambda}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\,-\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}-\frac{q_1}{\lambda}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,-\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\right\}e^{i\lambda'a}$$

$$\mathcal{R}^{ps}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}-\frac{q_1}{\lambda}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\right\}e^{i\lambda'a}$$

$$\mathcal{R}^{sp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left\{\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\cdot\frac{q_1'}{\lambda'}\right\}e^{i\lambda'a}$$

$$\mathcal{R}^{ss}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,-\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}e^{i\lambda'a}$$

bzw.

$$\mathcal{T}^{pp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = p\,\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}\,e^{i\lambda a}-\frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\,-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}\right.$$
$$\left.+\frac{q_1}{\lambda}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\frac{q_1}{\lambda}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}\right\}e^{i\lambda'a}$$

$$\mathcal{T}^{ps}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\frac{q_1}{\lambda}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\right\}e^{i\lambda'a}$$

$$\mathcal{T}^{sp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot\left\{\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\,-\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}+\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,-\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_1'}{\lambda'}\right\}e^{i\lambda'a}$$

$$\mathcal{T}^{ss}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\,\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\,-\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}e^{i\lambda'a}$$

$$\Gamma^{pp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}e^{i\lambda a} - \frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0} - \left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_3(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_{1\parallel}'}{\lambda'}\right.$$

$$\left. - \frac{q_{1\parallel}}{\lambda}\left(\frac{\delta j_3(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0} + \frac{q_{1\parallel}}{\lambda}\left(\frac{\delta j_3(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_3(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_{1\parallel}'}{\lambda'}\right\}$$

$$\Gamma^{ps}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{c\lambda}{\omega}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left\{\left(\frac{\delta j_p(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0} - \frac{q_{1\parallel}}{\lambda}\left(\frac{\delta j_3(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\right\}$$

$$\Gamma^{sp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = -\frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left\{\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_p(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0} - \left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_3(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}\frac{q_{1\parallel}'}{\lambda'}\right\}$$

$$\Gamma^{ss}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2',\omega) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}e^{i\lambda a} - \frac{\omega}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\left(\frac{\delta j_s(q_1q_2\lambda\omega)}{\delta\mathcal{E}^{ext}_s(q_1'q_2'\lambda'\omega)}\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0}.$$

Wie aus der Theorie des linearen Respons' bekannt[3], sind die angeschriebenen Variationsableitungen gegeben durch die retardierten Stromdichte-Korrelationsfunktionen und die lokale Plasmafrequenz des Systems:

$$\left(\delta j_\mu(q\omega)/\delta\mathcal{E}^{ext}_\nu(q'\omega)\right)_{\mathcal{E}^{ext}=0} = {}^1/_{i\omega}\left\{\chi_{j_\mu j_\nu}(q,q',\omega) - \omega_p^2(qq')\right\}$$

Dabei ist die Stromdichte-Korrelationsfunktion:

$$\chi_{j_\mu j_\nu}(\nu t,\nu' t') := {}^i/_\hbar\,\Theta(t-t')\langle\left[j_\mu(\nu t), j_\nu(\nu' t')\right]_-\rangle$$

$$\Leftrightarrow \chi_{j_\mu j_\nu}(qt,q't') = {}^i/_\hbar\,\Theta(t-t')\langle\left[j_\mu(qt), j_\nu(q't')\right]_-\rangle \qquad (3.2)$$

und (i: Teilchenart) die lokale Plasmafrequenz:

$$\omega_p^2(\nu,\nu')_{\mu\nu} := \sum_i e^i/_{m_i}\,\varrho_i(\nu)\,\delta(\nu-\nu')\,\delta_{\mu\nu} \Leftrightarrow \omega_p^2(q,q')_{\mu\nu} = \sum_i e^i/_{m_i}\,\varrho_i(q-q')\,\delta_{\mu\nu}. \qquad (3.3)$$

Man sieht aber sofort, daß in den oben angeschriebenen Ausdrücken für die RTK die longitudinalen Anteile der Responsfunktionen herausprojiziert werden; jene hängen also nur von den rein transversalen Anteilen von $\chi_{j_\mu j_\nu}(qq',\omega)$ und $\omega_p^2(qq')_{\mu\nu}$ ab. Das ist auch der Grund, warum Plasmonen (in linearer Optik) nicht direkt optisch "sichtbar" sind: Der Plasmon-Pol wird gerade herausprojiziert aus den RTK.

Im einzelnen lauten die Koeffizienten ausgedrückt durch diese Funktionen (und fortgesetzt in die obere Frequenz-Halbebene):

$$R^{pp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -c\lambda/2\cdot 1/2c\cdot 1/i2\{(\chi j_0 j_0(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{pp}$$
$$-\chi j_0 j_3(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda',z)q_1''/\lambda' + q_1''/\lambda\,\chi j_3 j_0(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda',z)$$
$$-q_1''/\lambda(\chi j_3 j_3(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{33})q_1''/\lambda'\}$$

$$R^{ps}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -c\lambda/2\cdot 1/2c\cdot 1/i2\{(\chi j_0 j_s(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{ps}$$
$$+q_1''/\lambda\,\chi j_3 j_s(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda',z)\}$$

$$R^{sp}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot 1/i2\{(\chi j_s j_0(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{sp}$$
$$-\chi j_s j_3(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda';z)q_1''/\lambda'\}$$

$$R^{ss}_{(1)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot 1/i2\{\chi j_s j_s(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{ss}\} \quad (3.4a\text{–}d)$$

$$R^{pp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -c\lambda/2\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/i2\{(\chi j_0 j_0(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{pp}$$
$$+\chi j_0 j_3(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)q_1''/\lambda' - q_1''/\lambda\,\chi j_3 j_0(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)$$
$$-q_1''/\lambda(\chi j_3 j_3(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda'))q_1''/\lambda'\}e^{i\lambda'a}$$

$$R^{ps}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -c\lambda/2\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/i2\{\chi j_0 j_s(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{ps}$$
$$-q_1''/\lambda\,\chi j_3 j_s(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)\}e^{i\lambda'a}$$

$$R^{sp}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/i2\{(\chi j_s j_0(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{sp}$$
$$+\chi j_s j_3(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)q_1''/\lambda'\}e^{i\lambda'a}$$

$$R^{ss}_{(2)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/i2\{\chi j_s j_s(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{ss}\}e^{i\lambda'a}$$
$$(3.4e\text{–}h)$$

bzw.

$$T^{pp}_{(z)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}\, e^{i\lambda' a}\cdot c\lambda/z\cdot 1/2c\cdot 1/iz\,\{(\chi j_p j_p(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{pp})$$
$$+\chi j_p j_3(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)\,q_{11}'/\lambda' + q_{11}/\lambda\,\chi j_3 j_p(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)$$
$$+ q_{11}/\lambda(\chi j_3 j_3(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{33})\,q_{11}'/\lambda'\}\, e^{i\lambda' a}$$

$$T^{ps}_{(z)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -c\lambda/z\cdot 1/2c\cdot 1/iz\,\{(\chi j_p j_s(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{ps})$$
$$+ q_{11}/\lambda\,\chi j_3 j_s(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)\}\, e^{i\lambda' a}$$

$$T^{sp}_{(z)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot 1/iz\,\{(\chi j_s j_p(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{sp})$$
$$+\chi j_s j_3(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z)\,q_{11}'/\lambda'\}\, e^{i\lambda' a}$$

$$T^{ss}_{(z)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}\, e^{i\lambda' a} - z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot 1/iz\,\{\chi j_s j_s(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2-\lambda,q_1'q_2'-\lambda')_{ss}\}\, e^{i\lambda' a}$$

(3.4i-l)

$$T^{pp}_{(\lambda)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}\, e^{i\lambda a} - c\lambda/z\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/iz\,\{(\chi j_p j_p(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{pp})$$
$$-\chi j_p j_3(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z)\,q_{11}'/\lambda' - q_{11}/\lambda\,\chi j_3 j_p(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z)$$
$$+ q_{11}/\lambda(\chi j_3 j_3(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{33})\,q_{11}'/\lambda'\}$$

$$T^{ps}_{(\lambda)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -c\lambda/z\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/iz\,\{(\chi j_p j_s(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{ps})$$
$$- q_{11}/\lambda\,\chi j_3 j_s(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z)\}$$

$$T^{sp}_{(\lambda)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = -z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/iz\,\{(\chi j_s j_p(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{sp})$$
$$-\chi j_s j_3(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z)\,q_{11}'/\lambda'\}$$

$$T^{ss}_{(\lambda)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_2q_2'}\, e^{i\lambda a} - z/c\lambda\cdot 1/2c\cdot e^{i\lambda a}\cdot 1/iz\,\{\chi j_s j_s(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda';z) - \omega_p^2(q_1q_2\lambda,q_1'q_2'\lambda')_{ss}\}$$

(3.4m-p)

Der Zusammenhang zwischen den elektromagnetischen RTK und den Stromdichte-Korrelationsfunktionen ist also trotz seiner Allgemeinheit ziemlich einfach.

4. Einfachste Hochfrequenz-Näherung

Für reelle Frequenzen *) ω, die groß sind gegenüber den in den Spektralfunktionen $\chi^{''}_{j_r j_s}(q_1 q_2' \lambda' \omega')$ vertretenen Frequenzen ω', kann eine einfache Näherung angegeben werden durch Vernachlässigung der χ gegenüber den ω_ρ^2 :

$$\mathcal{R}^{tr}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \left\{ \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho\rho} - q_\nu'/\lambda \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho 3} \, q_\nu'/\lambda' \right\}$$

$$\mathcal{R}^{rs}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \cdot \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho s}$$

$$\mathcal{R}^{sp}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \cdot \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{s\rho}$$

$$\mathcal{R}^{ss}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \cdot \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{ss} \qquad (4.1a\text{-}d)$$

$$\mathcal{R}^{tr}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} 1/i\omega \left\{ \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho\rho} - q_\nu'/\lambda \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho 3} \, q_\nu'/\lambda' \right\} e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{R}^{rs}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} 1/i\omega \cdot \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho s} e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{R}^{sp}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} \cdot 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{s\rho} e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{R}^{ss}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} \cdot 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{ss} e^{i\lambda' a} \qquad (4.1e\text{-}h)$$

$$\mathcal{T}^{tr}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx L^2 \delta_{q_1 q_1'} \delta_{q_2 q_2'} e^{i\lambda' a} + c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \left\{ \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho\rho} + q_\nu'/\lambda \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho 3} \, q_\nu'/\lambda' \right\} e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{T}^{rs}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho s} e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{T}^{sp}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{s\rho} e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx L^2 \delta_{q_1 q_1'} \delta_{q_2 q_2'} e^{i\lambda' a} + \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{ss} e^{i\lambda' a} \qquad (4.1i\text{-}l)$$

$$\mathcal{T}^{tr}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx L^2 \delta_{q_1 q_1'} \delta_{q_2 q_2'} e^{i\lambda a} + c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} 1/i\omega \left\{ \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho\rho} + q_\nu'/\lambda \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho 3} \, q_\nu'/\lambda' \right\}$$

$$\mathcal{T}^{rs}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx c\lambda/\omega \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{\rho s}$$

$$\mathcal{T}^{sp}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{s\rho}$$

$$\mathcal{T}^{ss}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', \omega) \approx L^2 \delta_{q_1 q_1'} \delta_{q_2 q_2'} e^{i\lambda a} + \omega/c\lambda \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} 1/i\omega \, \omega_\rho^2 (q_1 q_2 \lambda, q_1' q_2' \lambda')_{ss} \qquad (4.1m\text{-}p)$$

---

*) Für reelle Frequenzen ω stört die implizite Abhängigkeit der $\chi^{''}_{j_r j_s}(q_1 q_2 \pm \lambda, q_1' q_2' \pm \lambda', \omega)$ von ω über die λ, λ' die folgende Überlegung durchaus nicht.

5. Der Energiefluß im Außenraum (Definitheits-Aussagen)

Nach dem Poyntingschen Satz ist die Energie, die im Laufe der Zeit insgesamt die Ebene x_3-const. von unten nach oben durchfließt, gegeben durch:

$$S(x_3) = 1/L^2 \sum_{q_1 q_2} 1/2\pi \int d\omega\, c \left\{ \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_s(q_1 q_2 x_3 \omega) - \mathcal{E}_s(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_\rho(q_1 q_2 x_3 \omega) \right\} \qquad (5.1)$$

In den asymptotischen Bereichen hat man folglich

1) $x_3 \to -\infty$

$$S^{(1)}(x_3) = 1/L^2 \sum_{q_1 q_2} 1/2\pi \int d\omega\, c \left\{ \mathcal{E}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_s^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) - \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) \right\} \qquad (5.2a)$$

2) $x_3 \to +\infty$

$$S^{(2)}(x_3) = 1/L^2 \sum_{q_1 q_2} 1/2\pi \int d\omega\, c \left\{ \mathcal{E}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_s^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) - \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) \right\} \qquad (5.2b)$$

Nun haben die asymptotischen Felder folgende Form

$$\mathcal{E}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} + \mathcal{E}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{B}_s^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \omega/c\lambda \left(\mathcal{E}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} - \mathcal{E}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{-i\lambda x_3} \right)$$

$$\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} + \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{B}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = -c\lambda/\omega \left(\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} - \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{-i\lambda x_3} \right) \qquad (5.3a\text{-}d)$$

$$\mathcal{E}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3 - a)} + \mathcal{E}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{i\lambda(x_3 - a)}$$

$$\mathcal{B}_s^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = -\omega/c\lambda \left(\mathcal{E}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3 - a)} - \mathcal{E}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{i\lambda(x_3 - a)} \right)$$

$$\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3 - a)} + \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{i\lambda(x_3 - a)}$$

$$\mathcal{B}_\rho^{(2)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = c\lambda/\omega \left(\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3 - a)} - \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out}\, e^{i\lambda(x_3 - a)} \right). \qquad (5.3e\text{-}h)$$

Beim Einsetzen in den Ausdruck für den integralen Energiestrom hat man zu beachten, daß wegen der Realität der Felder gilt

$$\mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 x_3 \omega)^* = \mathcal{E}_\rho(-q_1 - q_2 x_3 - \omega) \Leftrightarrow \mathcal{E}_{\rho/s}^{(i)}(q_1 q_2 \omega)_{in/out}^* = -\mathcal{E}_{\rho/s}^{(i)}(-q_1 - q_2 - \omega)_{in/out}\,.$$

Daher folgt

$$S^{(1)}_{\cdot\cdot} = S^{(1)}(x_3)$$

$$= 1/L^2 \sum_{q_1 q_2} 1/2\pi \int d\omega \Big[\Theta(\omega^2 - c^2 q_{\perp}^2) \cdot c \Big\{ \omega/c\lambda \big(|\mathcal{E}_p^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}|^2 - |\mathcal{E}_p^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out}|^2 \big)$$
$$+ c\lambda/\omega \big(|\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}|^2 - |\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out}|^2 \big) \Big\}$$
$$- \Theta(c^2 q_{\perp}^2 < \omega^2) \cdot c \Big\{ \omega/c|\lambda| \big(2\,\mathrm{Im}\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}^{*}\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out} \big)$$
$$- c|\lambda|/\omega \big(2\,\mathrm{Im}\, \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in}^{*}\, \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{out} \big) \Big\} \Big] \qquad (5.4a)$$

bzw.

$$S^{(2)}_{\cdot\cdot} = S^{(2)}(x_3)$$

$$= -1/L^2 \sum_{q_1 q_2} 1/2\pi \int d\omega \Big[\Theta(\omega^2 - c^2 q_{\perp}^2) \cdot c \Big\{ \omega/c\lambda \big(|\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}|^2 - |\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out}|^2 \big)$$
$$+ c\lambda/\omega \big(|\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}|^2 - |\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out}|^2 \big) \Big\}$$
$$- \Theta(c^2 q_{\perp}^2 < \omega^2) \cdot c \Big\{ \omega/c|\lambda| \big(2\,\mathrm{Im}\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}^{*}\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out} \big)$$
$$- c|\lambda|/\omega \big(2\,\mathrm{Im}\, \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}^{*}\, \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{out} \big) \Big\} \Big] \qquad (5.4b)$$

Wenn das vorliegende System im thermischen Gleichgewicht liegt, muß die Differenz $S^{(1)} - S^{(2)}$ größer als Null sein. Es sei daran erinnert, daß vereinbarungsgemäß *) immer $\mathcal{E}_{p/s}^{(i)}(q_1 q_2 \omega)_{in} = 0$ gilt, wenn $\omega^2 = c^2 q_{\perp}^2$ ist, daß also das angewandte Feld keine Anteile enthält, die "streifender Inzidenz" entsprechen. Daher ist eine Situation wie die angezeichnete,

Abb.3

in der $S^{(1)} - S^{(2)} \leq 0$ wäre, ausgeschlossen. Aus dieser Definitheits-Aussage

$$\Delta E := S^{(1)} - S^{(2)} > 0 \qquad (5.5)$$

folgen einige Definitheits-Aussagen für gewisse hermitesche Bildungen aus den RTK.

---

*) p.4 Fußnote

Gl. (5.5) lautet ausführlich:

$$
\begin{aligned}
\Delta E = {}& \tfrac{1}{2\pi}\int d\omega\, \tfrac{1}{L^2}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}\Big[\delta(\omega^2-c^2\vec{q}_1^{\,2})c\Big\{\tfrac{\omega}{2}\lambda\big(\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)^*_{in}\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)_{in}+\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)^*_{in}\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)_{in}\\
&-\tfrac{1}{L^4}\sum_{\substack{\vec{q}_1',\vec{q}_2'\\ \vec{q}_1'',\vec{q}_2''}}\Big\{\big\{\mathcal{R}^{PP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{R}^{PS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\\
&+\mathcal{T}^{PP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{T}^{PS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\big\}\\
&\cdot\big\{\mathcal{R}^{PP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{R}^{PS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\\
&+\mathcal{T}^{PP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{T}^{PS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\big\}\\
&+\big\{\mathcal{R}^{PP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{R}^{PS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\\
&+\mathcal{T}^{PP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{T}^{PS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\big\}\\
&\cdot\big\{\mathcal{R}^{PP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{R}^{PS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\\
&+\mathcal{T}^{PP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{T}^{PS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\big\}\big)\\
&+c\lambda\omega\big(\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)^*_{in}\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)_{in}+\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)^*_{in}\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\omega)_{in}\\
&-\tfrac{1}{L^4}\sum_{\substack{\vec{q}_1',\vec{q}_2'\\ \vec{q}_1'',\vec{q}_2''}}\Big\{\big\{\mathcal{R}^{SP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{R}^{SS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\\
&+\mathcal{T}^{SP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{T}^{SS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\big\}\\
&\cdot\big\{\mathcal{R}^{SP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{R}^{SS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\\
&+\mathcal{T}^{SP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{T}^{SS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\big\}\\
&+\big\{\mathcal{R}^{SP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{R}^{SS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\\
&+\mathcal{T}^{SP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}+\mathcal{T}^{SS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1',\vec{q}_2';\omega)^*\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1',\vec{q}_2',\omega)^*_{in}\big\}\\
&\cdot\big\{\mathcal{R}^{SP}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{R}^{SS}_{(2)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(2)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\\
&+\mathcal{T}^{SP}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_P^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}+\mathcal{T}^{SS}_{(1)}(\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_1'',\vec{q}_2'';\omega)\,\mathcal{E}_S^{(1)}(\vec{q}_1'',\vec{q}_2'',\omega)_{in}\big\}\big)\big\}\big\}-
\end{aligned}
$$

(5.6)

oder

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi}\int d\omega \, \frac{1}{L^2}\sum_{q_1 q_2}\frac{1}{L^2}\sum_{\bar q_1' \bar q_2'} \begin{bmatrix} \mathcal{E}_p^{(1)}(\bar q_1' \bar q_2' \omega)^*_{in} \\ \mathcal{E}_p^{(2)}(\bar q_1' \bar q_2' \omega)^*_{in} \\ \mathcal{E}_s^{(1)}(\bar q_1' \bar q_2' \omega)^*_{in} \\ \mathcal{E}_s^{(2)}(\bar q_1' \bar q_2' \omega)^*_{in} \end{bmatrix}^t \begin{bmatrix} W^{pp}_{(11)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{pp}_{(12)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ps}_{(11)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ps}_{(12)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) \\ W^{pp}_{(21)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{pp}_{(22)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ps}_{(21)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ps}_{(22)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) \\ W^{sp}_{(11)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{sp}_{(12)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ss}_{(11)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ss}_{(12)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) \\ W^{sp}_{(21)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{sp}_{(22)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ss}_{(21)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) & W^{ss}_{(22)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}_p^{(1)}(\bar q_1 \bar q_2 \omega)_{in} \\ \mathcal{E}_p^{(2)}(\bar q_1 \bar q_2 \omega)_{in} \\ \mathcal{E}_s^{(1)}(\bar q_1 \bar q_2 \omega)_{in} \\ \mathcal{E}_s^{(2)}(\bar q_1 \bar q_2 \omega)_{in} \end{bmatrix}$$

(5.7)

mit den Komponenten *)

$$\begin{aligned} W^{pp}_{(11)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) := \tfrac{1}{L^2}\sum_{q_1 q_2} \Big[& \Theta(\omega^2 - c^2 q_\parallel^2)\, c \Big\{ \tfrac{\omega}{c\lambda}\Big(L^2 \delta_{\bar q_1' q_1} \delta_{\bar q_2' q_2} L^2 \delta_{q_1 \bar q_1} \delta_{q_2 \bar q_2} \\ & - \mathcal{R}^{pp}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{R}^{pp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) - \mathcal{T}^{pp}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{T}^{pp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega)\Big) \\ & - \tfrac{c\lambda}{\omega}\Big(\mathcal{R}^{ps}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{R}^{sp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) + \mathcal{T}^{ps}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{T}^{sp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega)\Big)\Big\} \\ & - \Theta(c^2 q_\parallel^2 - \omega^2)\, c \Big\{ \tfrac{\omega}{c\lambda}\Big(L^2 \delta_{\bar q_1' q_1} \delta_{\bar q_2' q_2} \mathcal{R}^{pp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) - \mathcal{R}^{pp}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ L^2 \delta_{q_1 \bar q_1} \delta_{q_2 \bar q_2}\Big)\Big\}\Big] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W^{pp}_{(12)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) := \tfrac{1}{L^2}\sum_{q_1 q_2} \Big[& \Theta(\omega^2 - c^2 q_\parallel^2)\, c \Big\{ -\tfrac{\omega}{c\lambda}\Big(\mathcal{R}^{pp}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{T}^{pp}_{(2)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) + \mathcal{T}^{pp}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega)\Big) \\ & - \tfrac{c\lambda}{\omega}\Big(\mathcal{R}^{ps}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{T}^{sp}_{(2)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) + \mathcal{T}^{ps}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{R}^{sp}_{(2)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega)\Big)\Big\} \\ & - \Theta(c^2 q_\parallel^2 - \omega^2)\, c \Big\{ \tfrac{\omega}{c\lambda}\Big(L^2 \delta_{\bar q_1' q_1} \delta_{\bar q_2' q_2} \mathcal{T}^{pp}_{(2)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) - \mathcal{T}^{pp}_{(1)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ L^2 \delta_{q_1 \bar q_1} \delta_{q_2 \bar q_2}\Big)\Big\}\Big] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W^{pp}_{(21)}(\bar q_1' \bar q_2', \bar q_1 \bar q_2, \omega) := \tfrac{1}{L^2}\sum_{q_1 q_2} \Big[& \Theta(\omega^2 - c^2 q_\parallel^2)\, c \Big\{ -\tfrac{\omega}{c\lambda}\Big(\mathcal{T}^{pp}_{(2)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{R}^{pp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) + \mathcal{R}^{pp}_{(2)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{T}^{pp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega)\Big) \\ & - \tfrac{c\lambda}{\omega}\Big(\mathcal{T}^{ps}_{(2)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{R}^{sp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) + \mathcal{R}^{ps}_{(2)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ \mathcal{T}^{sp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega)\Big)\Big\} \\ & - \Theta(c^2 q_\parallel^2 - \omega^2)\, c \Big\{ \tfrac{\omega}{c\lambda}\Big(L^2 \delta_{\bar q_1' q_1} \delta_{\bar q_2' q_2} \mathcal{T}^{pp}_{(1)}(q_1 q_2, \bar q_1 \bar q_2, \omega) - \mathcal{T}^{pp}_{(2)}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ L^2 \delta_{q_1 \bar q_1} \delta_{q_2 \bar q_2}\Big)\Big\}\Big] \end{aligned}$$

(5.8)

u.ä. Die positive Definitheit der Operatoren-Matrix als ganzes hat zur Folge, daß auch die aus ihr nach Art der Haupt-Unterdeterminanten gebildeten Operatoren positiv definit **) sind. Speziell gilt dies für die Operatoren auf der Hauptdiagonalen.

---

*) $\mathcal{R}^{ps}(\bar q_1' \bar q_2', q_1 q_2, \omega)^+ := \mathcal{R}^{sp}(q_1 q_2, \bar q_1' \bar q_2', \omega)^*$ u.ä.

**) natürlich immer unter der oben angeführten Nebenbedingung!

6. Das analytische Verhalten der RTK

Oben konnte schon die Fortsetzung der Koeffizienten in die obere Frequenz-Halbebene angeschrieben werden, da

i) λ sich holomorph in die obere z-Halbebene fortsetzen läßt

ii) $\chi_{j_\rho j_\nu}(qq';z)$ sich bekanntlich holomorph in die obere z-Halbebene fortsetzen läßt

iii) $\chi_{j_\rho j_\nu}(qq';z)$ und $\omega_\rho^2(qq')_{\rho\nu}$ wegen der "Endlichkeit" des Systems in x_3-Richtung holomorph in der ganzen q_3- bzw. q_3'-Ebene sind[4],

so daß es gesichert ist, daß durch die Spezifizierung $q_3 = \pm\lambda$, $q_3' = \pm\lambda'$ wieder Funktionen entstehen, die in der oberen z-Halbebene holomorph sind. Folglich sind auch die RTK dort analytisch. Kritisch sind nur die (reellen) Punkte $z = 0$ und $z = \pm cq_\alpha$, $z = \pm cq_\alpha'$:

(i) $z = 0$: Da die Korrelationsfunktionen $\chi_{j_\rho j_\nu}(qq';z)$ u.ä. bei $z = 0$ regulär sind, ist die Regularität für die Koeffizienten $\mathcal{R}_{(i)}^{s\rho}, \mathcal{R}_{(i)}^{ss}$ und $\mathcal{T}_{(i)}^{s\rho}, \mathcal{T}_{(i)}^{ss}$ sowieso klar. Bezüglich der Koeffizienten $\mathcal{R}_{(i)}^{\rho\rho}, \mathcal{R}_{(i)}^{\rho s}$ und $\mathcal{T}_{(i)}^{\rho\rho}, \mathcal{T}_{(i)}^{\rho s}$ betrachte man z.B. $\mathcal{R}_{(i)}^{\rho\rho}(q_1q_2,q_1'q_2';z)$, das sich wegen $\lambda = iq_\alpha(1-\frac{1}{2}(\frac{z}{cq_\alpha})^2+\dots)$ umformt zu

$$-q_\alpha/2z^2\{\chi_{j_\rho j_\rho}(q_1q_2-iq_\alpha,q_1'q_2'iq_\alpha';z)-\omega_\rho^2(q_1q_2-iq_\alpha,q_1'q_2'iq_\alpha')_{\rho\rho}$$
$$+\chi_{j_\rho j_3}(q_1q_2-iq_\alpha,q_1'q_2'iq_\alpha';z)i-i\chi_{j_3 j_\rho}(q_1q_2-iq_\alpha,q_1'q_2'iq_\alpha';z)$$
$$-i(\chi_{j_3 j_3}(q_1q_2-iq_\alpha,q_1'q_2'iq_\alpha';z)-\omega_\rho^2(q_1q_2-iq_\alpha,q_1'q_2'iq_\alpha')_{33})i\}+O(z^0)$$

Der Ausdruck in geschweiften Klammern ist auf Grund der Kontinuitätsgl. gleich

$$z^2\,1/q_\alpha\,\chi_{s\rho}(q_1q_2-iq_\alpha,q_1'q_2'iq_\alpha';z)\cdot 1/q_\alpha$$

Es folgt die Regularität bei $z = 0$.

(ii) $z = \pm cq_{\alpha}$, $z = \pm cq'_{\alpha}$ (streifende Emission bzw. Inzidenz):

Die Singularität in diesen Punkten ist so schwach, daß für die reelle Frequenz-Integration keine Probleme auftreten.

Die Holomorphie der RTK spiegelt das Kausalitätsprinzip wieder: Es kann von dem System nichts reflektiert oder transmittiert werden, bevor nicht (externe) Felder "angewandt" werden.

Versteht man unter den Korrelationsfunktionen in den Gln. (3.4) die avancierten Funktionen und wählt λ und λ' vom unteren Ufer des Schnittes gemäß Abb. (2), so werden gewisse RTK definiert, die sich auf die ganze untere z-Halbebene holomorph fortsetzen lassen.[3] Wenn man so will, kann man von "avancierten RTK" sprechen im Gegensatz zu den bisher betrachteten in der oberen z-Halbebene holomorphen "retardierten RTK". Speziell für die avancierten Transmissionskoeffizienten ist es tunlich, die Indices "1" und "2" gegenüber der Definition der retardierten Transmissionskoeffizienten in den Gln. (3.4) zu vertauschen. Diese Freiheit hat man offensichtlich, ja es ist physikalisch nicht unvernünftig (Vertauschung der zeitlichen Reihenfolge!). Der Hauptvorteil wird eine größere Symmetrie und die Existenz einer Spektraldarstellung auch für die Transmissionskoeffizienten sein (s.w.u.).

Die retardierten bzw. avancierten RTK lassen sich offenbar auch als Einschränkung von Funktionen auf die obere bzw.

untere z-Halbebene auffassen, die in der ganzen z-Ebene mit Ausnahme der reellen Achse definiert sind und in Anlehnung an die Nomenklatur der Green-Funktionen "kausale RTK" heißen können.

Zusammenfassend kann man folglich die RTK auffassen als Funktionen der komplexen Frequenz z, die aus einem in der längs der reellen Achse aufgeschnittenen z-Ebene holomorphen Zweig ("physikalischer Zweig") und den Fortsetzungen über die reelle Achse hinaus ("unphysikalischer Zweig") bestehen. Als physikalische RTK $\mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; \omega)$ u.ä. für reelle Frquenzen ω sind dabei immer die Limites "von oben" zu verstehen:

$$\mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; \omega) := \lim_{\varepsilon \searrow 0} \mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; \omega + i\varepsilon).$$

Bez. des Verhaltens der RTK für $z \to \infty$ auf dem physikalischen Blatt soll angenommen werden, daß die (diagonalen) Transmissionskoeffizienten $\mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z)$ und $\mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z)$ gegen $l^2 \delta_{q_1 q_1'} \delta_{q_2 q_2'} e^{i\lambda a}$, die übrigen RTK gegen Null streben.*) Diese Annahme wird bestätigt für die RTK einfacher Modelle (s.w.u.).

---

*) Diese Annahme ist durchaus nicht unproblematisch. Mathematisch gesehen: die RTK haben bei $z = \infty$ eine wesentliche Singularität. Der physikalische Grund ist offenbar darin zu sehen, daß für $|\mathrm{Im}\, z| \to \infty$ die Abklinglänge $(\mathrm{Im}\,\lambda)^{-1}$ des externen Feldes kürzer wird als die Strecke, über die die Dichte des Systems am Rande abklingt. Es sei denn, man betrachtet einen wirklich scharfen Rand. Man beachte auch, daß das Auftreten einer wesentlichen Singularität

Aus diesen beiden Eigenschaften der RTK auf dem physikalischen Blatt, Holomorphie und Verhalten für $z \to \infty$, folgt wiederum eine Spektraldarstellung für den physikalischen Zweig der RTK, wie man sie ähnlich für Greenfunktionen, Responsfunktionen etc. kennt. Diese Spektraldarstellung läßt sich kompakt anschreiben, wenn man, statt die einzelnen RTK zu betrachten, folgende Matrizen einführt:

$$\mathbb{R}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) := \begin{bmatrix} z/c\lambda\, R^{pp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) & z/c\lambda\, R^{ps}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) \\ c\lambda/z\, R^{sp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) & c\lambda/z\, R^{ss}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{T}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) := \begin{bmatrix} z/c\lambda\, T^{pp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) & z/c\lambda\, T^{ps}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) \\ c\lambda/z\, T^{sp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) & c\lambda/z\, T^{ss}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) \end{bmatrix} - L^2\delta_{q_1q_1'}\delta_{q_1q_2'}\, e^{i\lambda a} \begin{bmatrix} z/\lambda & 0 \\ 0 & c\lambda/z \end{bmatrix} \qquad (6.1a\text{-}b)$$

Diese Matrizen sind auf dem physikalischen Blatt holomorph und streben der Annahme gemäß für $z \to \infty$ gegen Null. Weiter unten wird sich zeigen, daß auch gewisse allgemeine Symmetrie-Eigenschaften der RTK sich mit Hilfe dieser Matrizen kompakt schreiben lassen. Insbesondere die Beziehung zwischen den Werten (des physikalischen Zweigs) der RTK auf der oberen und unteren z-Halbebene lautet einfach:

$$-\mathbb{R}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) = \mathbb{R}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z)^+ \qquad (i = 1,2)$$

$$-\mathbb{T}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) = \mathbb{T}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z)^+ \qquad "$$

Aus ihr ergeben sich folgende Spektraldarstellungen für den physikalischen Zweig der RTK:

$$\mathbb{R}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi}\, \frac{\mathbb{A}^{(i)}_R(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)}{\omega - z}$$

$$\mathbb{T}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi}\, \frac{\mathbb{A}^{(i)}_T(q_1q_2,q_1'q_2';\omega)}{\omega - z} \qquad (6.2a\text{-}b)$$

---

an die Endlichkeit von c geknüpft ist. Wenn man im elektrostatischen Limes ($c \to \infty$) rechnet, wie z.B. bei Berechnungen der Bildkraft u.ä.[5], ist das pathologische Verhalten für $z \to \infty$ eliminiert.

Dabei sind die Spektraldichten durch den Sprung von $\mathbb{R}_{(i)}(z)$ bzw. $\mathbb{T}_{(i)}(z)$ an der reellen Achse gegeben und anti-hermitesch:

$$A_R^{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega) := \lim_{\varepsilon\searrow 0} 1/2i \left\{ \mathbb{R}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega+i\varepsilon) - \mathbb{R}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega-i\varepsilon) \right\}$$

$$A_T^{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega) := \lim_{\varepsilon\searrow 0} 1/2i \left\{ \mathbb{T}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega+i\varepsilon) - \mathbb{T}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';\omega-i\varepsilon) \right\} \qquad (6.3a\text{-}b)$$

Beweis: *) a) Für z aus der oberen Halbebene des physikalischen Blattes gilt:

$$\mathbb{R}_{(i)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\mathbb{R}_{(i)}(\omega+i\varepsilon)}{\omega - z} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \mathbb{R}_{(i)}(\omega+i\varepsilon) \left\{ \frac{1}{\omega - z} \pm \frac{1}{\omega - z^*} \right\}$$

Der wahlweise zu addierende oder zu subtrahierende Beitrag verschwindet natürlich.

Es folgt:

$$\mathbb{R}_{(i)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mathbb{R}_{(i)}(\omega+i\varepsilon)(-i) \mathrm{Re} \frac{1}{\omega - z} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mathbb{R}_{(i)}(\omega+i\varepsilon) \mathrm{Im} \frac{1}{\omega - z}$$

Die (eindeutige) Zerlegung von $\mathbb{R}_{(i)}(z)$ in einen hermiteschen und einen anti-hermiteschen Teil

$$\mathbb{R}_{(i)}(z) = \mathbb{R}^1_{(i)}(z) + i\,\mathbb{R}^2_{(i)}(z)$$

führt auf die Darstellungen:

$$\mathbb{R}_{(i)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mathbb{R}^2_{(i)}(\omega+i\varepsilon) \mathrm{Re} \frac{1}{\omega - z} - i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mathbb{R}^1_{(i)}(\omega+i\varepsilon) \mathrm{Re} \frac{1}{\omega - z}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mathbb{R}^1_{(i)}(\omega+i\varepsilon) \mathrm{Im} \frac{1}{\omega - z} + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mathbb{R}^2_{(i)}(\omega+i\varepsilon) \mathrm{Im} \frac{1}{\omega - z}$$

Aufgrund der erwähnten Eindeutigkeit der Zerlegung darf man "über Kreuz zusammenstückeln" und hat:

$$\mathbb{R}_{(i)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{-\mathbb{R}^2_{(i)}(\omega+i\varepsilon)}{\omega - z} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{-i\,\mathbb{R}^1_{(i)}(\omega+i\varepsilon)}{\omega - z}$$

---

*) Es genügt der Beweis für $\mathbb{R}_{(i)}(z)$.

b) Für z aus der unteren Halbebene des physikalischen Blattes erhält man mit den analogen Argumenten:

$$\mathcal{R}_{(i)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{-\mathcal{R}^2_{(i)}(\omega - i\varepsilon)}{\omega - z} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{i\mathcal{R}^1_{(i)}(\omega - i\varepsilon)}{\omega - z}$$

c) Nun ist

$$\mathcal{R}^1_{(i)}(z) := \tfrac{1}{2}\left\{\mathcal{R}_{(i)}(z) + \mathcal{R}_{(i)}(z)^+\right\} = -\mathcal{R}^1_{(i)}(z^*)$$

$$\mathcal{R}^2_{(i)}(z) := \tfrac{1}{2i}\left\{\mathcal{R}_{(i)}(z) - \mathcal{R}_{(i)}(z)^+\right\} = \mathcal{R}^2_{(i)}(z^*)$$

so daß speziell gilt: $\mathcal{R}^1(\omega + i\varepsilon) = -\mathcal{R}^{(*)}(\omega - i\varepsilon)$ und

$$\mathcal{R}_{(i)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{-i\mathcal{R}'_{(i)}(\omega + i\varepsilon)}{\omega - z}$$

für z auf dem ganzen physikalischen Blatt.

q.e.d.

Beiläufig ergeben sich aus diesem Beweis Kramers-Kronig-Relationen für die hermiteschen und anti-hermiteschen Teile von $\mathcal{R}_{(i)}$ und $\mathcal{T}_{(i)}$: *)

$$\mathcal{R}^1_{(i)}(\omega) = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{R}^2_{(i)}(\omega')}{\omega' - \omega}\,, \quad \mathcal{R}^2_{(i)}(\omega) = -\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{R}^1_{(i)}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

$$\mathcal{T}^1_{(i)}(\omega) = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{T}^2_{(i)}(\omega')}{\omega' - \omega}\,, \quad \mathcal{T}^2_{(i)}(\omega) = -\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{T}^1_{(i)}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

Kramers-Kronig-Relationen zwischen Real- und Imaginärteil erhält man analog durch Zerlegung von $\mathcal{R}_{(i)}(\omega)$ und $\mathcal{T}_{(i)}(\omega)$ in Real- und Imaginärteil

$$\mathcal{R}_{(i)}(\omega) = \mathcal{R}'_{(i)}(\omega) + i\,\mathcal{R}''_{(i)}(\omega) \qquad \text{etc.}$$

statt in den hermiteschen und den anti-hermiteschen Teil, nämlich:

$$\mathcal{R}'_{(i)}(\omega) = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{R}''_{(i)}(\omega')}{\omega' - \omega}\,, \quad \mathcal{R}''_{(i)}(\omega) = -\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{R}'_{(i)}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

$$\mathcal{T}'_{(i)}(\omega) = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{T}''_{(i)}(\omega)}{\omega' - \omega}\,, \quad \mathcal{T}''_{(i)}(\omega) = -\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{T}'_{(i)}(\omega')}{\omega' - \omega}$$

---

*) Natürlich ist wieder $\mathcal{R}^1_{(i)}(\omega) := \lim_{\varepsilon \to 0} \mathcal{R}^1_{(i)}(\omega + i\varepsilon)$!

Die letzteren Relationen stehen aber nicht in Verbindung mit einer Spektral-Darstellung für $\mathbb{R}_{(\omega)}(z)$ bzw. $\mathbb{T}_{(\omega)}(z)$. Lediglich bei Vorliegen weiterer Symmetrien des Systems fallen die beiden Typen von Kramers-Kronig-Relationen zusammen (Realität des hermiteschen Teils etc.).

7. Symmetrie-Aussagen

Die aufgestellten Beziehungen zwischen den linearen RTK einerseits und den Stromdichte-Korrelationsfunktionen andererseits ermöglichen es, die Symmetrie-Beziehungen unter den ersteren systematisch herzuleiten. Im Hinblick auf die magneto-optischen Effekte soll im folgenden immer die Situation betrachtet werden, daß die jeweilige Symmetrie des Systems durch ein angelegtes homogenes und konstantes Magnetfeld B eventuell aufgehoben ist.

1. Aus der Realität des elektrischen Feldes (in Orts-Zeit-Darstellung) folgt eine Symmetrie-Relation bez. Spiegelung an der imaginären Frequenz-Achse

$$\mathbb{R}^{\alpha\beta}_{(\omega)}(q_1,q_2,q_1',q_2';-\bar{z}^*) = \mathbb{R}^{\alpha\beta}_{(\omega)}(-q_1,-q_2,-q_1',-q_2';z)^*$$

$$\mathbb{R}^{\alpha\beta}_{(\omega)}(q_1,q_2,q_1',q_2';-z^*) = \mathbb{R}^{\alpha\beta}_{(\omega)}(-q_1,-q_2,-q_1',-q_2';\bar{z})^* \qquad (7.1)$$

usw.

Man überprüft sie leicht an den oben angegebenen Ausdrücken, wenn man berücksichtigt, daß dem Übergang $z \to -z^*$ die Übergänge $\lambda \to -\lambda^*$ und $e^{-i\lambda x_3} \to (e^{-i\lambda x_3})^*$ entsprechen und die Beziehung

$$\chi^{j_1 j_2}_{\alpha\beta}(q,q';-z^*) = \chi^{j_1 j_2}_{\alpha\beta}(q,q';z)^*$$

$$\Leftrightarrow \chi^{j_1 j_2}_{\alpha\beta}(-q'',-q''';-z^*) = \chi^{j_1 j_2}_{\alpha\beta}(q,q';z)^*$$

gilt.

2. Den Zusammenhang zwischen den retardierten und avancierten Funktionen, d.h. zwischen den Werten des physikalischen Zweiges der Funktionen oberhalb und unterhalb der reellen Achse, gibt eine Symmetrie-Relation gegenüber Spiegelung an der reellen Achse an. Zunächst gilt nämlich

$$\chi_{j_\mu j_\nu}(r,r';z^*) = \chi_{j_\nu j_\mu}(r',r;z)^*$$

$$\Leftrightarrow \chi_{j_\mu j_\nu}(q^*,q'^*;z^*) = \chi_{j_\nu j_\mu}(q',q;z)^*$$

und

$$\lambda(z^*) = -\lambda^*(z) \equiv -\lambda^*$$

Es folgt ($i = 1,2$)

$$\begin{aligned}
z^*/c\lambda^* \, \mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) &= (z/c\lambda' \mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_1'q_2',q_1q_2;z))^* \\
z^*/c\lambda^* \, \mathcal{R}^{ps}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) &= (c\lambda'/z \, \mathcal{R}^{sp}_{(i)}(q_1'q_2',q_1q_2;z))^* \\
c\lambda^*/z^* \, \mathcal{R}^{ss}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) &= (c\lambda'/z \, \mathcal{R}^{ss}_{(i)}(q_1'q_2',q_1q_2;z))^* \\
\\
z^*/c\lambda^* \, \mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) &= (z/c\lambda' \mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_1'q_2',q_1q_2;z))^* \\
z^*/c\lambda^* \, \mathcal{T}^{ps}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) &= (c\lambda'/z \, \mathcal{T}^{sp}_{(i)}(q_1'q_2',q_1q_2,z))^* \\
c\lambda^*/z^* \, \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2';z^*) &= (c\lambda'/z \, \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1'q_2',q_1q_2,z))^*
\end{aligned} \qquad (7.2a\text{-}f)$$

3. Aus der Zeitumkehr-Invarianz des Systems folgt

$$\chi_{j_\mu j_\nu}(q,q',z;B) = \chi_{j_\nu j_\mu}(-q',-q,z;-B)$$

und somit ($i,j = 1,2 \Rightarrow i+j$) :

$$\begin{aligned}
z/c\lambda \, \mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2',z;B) &= z/c\lambda' \, \mathcal{R}^{pp}_{(i)}(-q_1',-q_2',-q_1,-q_2,z;-B) \\
z/c\lambda \, \mathcal{R}^{ps}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2',z;B) &= c\lambda'/z \, \mathcal{R}^{sp}_{(i)}(-q_1',-q_2',-q_1,-q_2,z;-B) \\
c\lambda/z \, \mathcal{R}^{ss}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2',z;B) &= c\lambda'/z \, \mathcal{R}^{ss}_{(i)}(-q_1',-q_2',-q_1,-q_2,z;-B) \\
\\
z/c\lambda \, \mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2',z;B) &= z/c\lambda' \, \mathcal{T}^{pp}_{(i,j)}(-q_1',-q_2',-q_1,-q_2,z;-B) \\
z/c\lambda \, \mathcal{T}^{ps}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2',z;B) &= c\lambda'/z \, \mathcal{T}^{sp}_{(i,j)}(-q_1',-q_2',-q_1,-q_2,z;-B) \\
c\lambda/z \, \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1q_2,q_1'q_2',z;B) &= c\lambda'/z \, \mathcal{T}^{ss}_{(i,j)}(-q_1',-q_2',-q_1,-q_2,z;-B)
\end{aligned} \qquad (7.3a\text{-}f)$$

In der Sprache der geometrischen Optik folgt also ($B = 0$) so etwas wie die "Umkehrbarkeit des Lichtweges". Die Faktoren $c\lambda/z = \cos\vartheta$ etc. geben die Verengung oder Weitung des Lichtbündels bei Reflexion bzw. Transmission wieder.

4. Bei Symmetrie des Systems gegen Spiegelung an der Mittelebene $x_3 = a/2$ hat man*)

$$\chi_{j_1 j_2}(q_1 q_2 q_1' q_2'; z; \mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3) = t^{j_1} t^{j_2} e^{-i q_3 a} \chi_{j_1 j_2}(q_1 - q_3, q_2 - q_3', q_1' - q_3', z; -\mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3)\, e^{i q_3' a}$$

u.ä. für $\mathcal{B}_F(q_1 q_3 q_1' q_3')_{\mu\nu}$. Dabei ist $t^j = (1, 1, -1)$.

Es folgt weiter

$$\mathcal{R}^{\sigma\sigma}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z; \mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3) = \mathcal{R}^{\sigma\sigma}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z; -\mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3)$$

$$\mathcal{R}^{\sigma s}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z; \mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3) = \mathcal{R}^{\sigma s}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z; -\mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3) \qquad (7.4)$$

usw. bis

$$\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z; \mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3) = \mathcal{T}^{ss}_{(2)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z; -\mathcal{B}_1 \mathcal{B}_3)$$

Die Symmetrien 1., 2., 3. faßt man am besten zusammen durch Betrachtung der Matrix-Operatoren $\mathcal{R}_{(i)}, \mathcal{T}_{(i)}$, wie oben (6.1) definiert. Für sie gilt:

1. $\mathcal{R}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; -z^*) = \mathcal{R}_{(i)}(-q_1 - q_2, -q_1' - q_2'; z)^*$
   $\mathcal{T}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; -z^*) = \mathcal{T}_{(i)}(-q_1 - q_2, -q_1' - q_2'; z)^*$
2. $\mathcal{R}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z^*) = -\mathcal{R}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z)^+$
   $\mathcal{T}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z^*) = -\mathcal{T}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z)^+$
3. $\mathcal{R}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z; \mathcal{B}) = \mathcal{R}_{(i)}(-q_1 - q_2, -q_1' - q_2', z; -\mathcal{B})^t$
   $\mathcal{T}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z; \mathcal{B}) = \mathcal{T}_{(i)}(-q_1 - q_2, -q_1' - q_2', z; -\mathcal{B})^t$

Dabei war

$$\mathcal{R}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) := \begin{bmatrix} 2/\lambda\, \mathcal{Q}^{\sigma\sigma}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) & 2/\lambda\, \mathcal{Q}^{\sigma s}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2', z) \\ c\lambda/2\, \mathcal{Q}^{s\sigma}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) & c\lambda/2\, \mathcal{Q}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{T}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) := \begin{bmatrix} 2/\lambda\, \mathcal{T}^{\sigma\sigma}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) & 2/\lambda\, \mathcal{T}^{\sigma s}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) \\ c\lambda/2\, \mathcal{T}^{s\sigma}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) & c\lambda/2\, \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2, q_1' q_2'; z) \end{bmatrix} - L^2 \delta_{q_1 q_1'} \delta_{q_2 q_2'} e^{i\lambda a} \begin{bmatrix} 2/\lambda & 0 \\ 0 & c\lambda/2 \end{bmatrix}$$

---

*) Lateinische Indices sollen immer nur die Werte 1 und 2 annehmen können.

5. Die Korrelationsfunktionen $\chi^{j_\rho j_\nu}(q,q';z;\mathcal{B})$ - und analog $\omega^{z}_{\rho}(q,q')_{\mu\nu}$ - lassen sich zerlegen nach den irreduziblen Darstellungen der Punktgruppe *) des Systems. Denn wenn $\{\beta|b\}$ ein Element der Raumgruppe des Systems ist, gilt

$$\chi^{j_\rho j_\nu}(\tau_{\beta q},\tau'_{\beta q'};z;\mathcal{B}_{\beta q}) = \beta_{\rho\kappa}\beta_{\nu\lambda}\chi^{j_\kappa j_\lambda}(\tau,\tau';z;\mathcal{B})$$

$$\Longleftrightarrow\quad e^{iqb}\chi^{j_\rho j_\nu}(\beta q,\beta q';z;\pm\beta\mathcal{B})\,e^{-iq'b} = \beta_{\rho\kappa}\beta_{\nu\lambda}\chi^{j_\kappa j_\lambda}(q,q';z;\mathcal{B}).$$

Dabei ist $\tau_{\beta q} := \{\beta|b\}\tau$ und $\mathcal{B}_{\beta q} := \pm\beta\mathcal{B}$, je nachdem ob β eine reine Drehung oder eine Drehspiegelung ist. Die $\chi^{j_\rho j_\nu}(q,q';z;\mathcal{B})$ sind also Basisfunktionen einer (reduziblen) Darstellung $\beta_{\rho\kappa}\beta_{\nu\lambda}$ der Punktgruppe.

Im Hinblick auf das folgende (Entartung des Systems zur Schicht) soll nur die Untergruppe der vollen Punktgruppe des Systems interessieren, die von den Drehungen um die x_3-Achse und Spiegelungen an Ebenen gebildet wird, die die x_3-Achse enthalten: die "ebene Punktgruppe" des Systems, um einen knappen Ausdruck zu haben. Zerlegung nach ihren jeweiligen irreduziblen Darstellungen zeigt, daß folgende, schon oben eingeführte fünf Größen

$$\chi^{j_0 j_0}(q,q';z) := q_1/q_\parallel\,\chi^{j_1 j_3}(q,q';z)\,q'_3/q'_\parallel \qquad \chi^{j_3 j_3}(q,q';z) := q_3/q_\parallel\,\chi^{j_1 j_3}(q,q';z)\,q'_3/q'_\parallel$$

$$\chi^{j_0 j_3}(q,q';z) := q_1/q_\parallel\,\chi^{j_1 j_3}(q,q';z) \qquad \chi^{j_3 j_0}(q,q';z) := \chi^{j_3 j_3}(q,q';z)\,q'_3/q'_\parallel \qquad (7.5a)$$

$$\chi^{j_3 j_3}(q,q';z)$$

Skalare und folgende, ebenfalls schon eingeführte vier Größen

$$\chi^{j_0 j_3}(q,q';z) := q_1/q_\parallel\,\chi^{j_1 j_3}(q,q';z)\,q'_3/q'_\parallel \qquad \chi^{j_3 j_0}(q,q';z) := q_3/q_\parallel\,\chi^{j_1 j_3}(q,q';z)\,q'_3/q'_\parallel$$

$$\chi^{j_3 j_3}(q,q';z) := q_3/q_\parallel\,\chi^{j_1 j_3}(q,q';z) \qquad \chi^{j_3 j_3}(q,q';z) := \chi^{j_3 j_3}(q,q';z)\,q'_3/q'_\parallel \qquad (7.5b)$$

---

*) Definitionen und Bezeichnungen nach: O. Madelung "Festkörpertheorie I u. II" Berlin, Heidelberg 1972

Pseudo-Skalare der vorliegenden ebenen Punktgruppe sind. *) Analog hat man für $\omega_\rho^2(q,q')_{r\nu}$ vorzugehen.

Es folgt, daß ebenso die "diagonalen" RTK

$R_{(i)}^{xx}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$, $R_{(i)}^{zz}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$, $T_{(i)}^{xx}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$, $T_{(i)}^{zz}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$

Skalare und die "außer-diagonalen"

$R_{(i)}^{xz}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$, $R_{(i)}^{zx}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$, $T_{(i)}^{xz}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$, $T_{(i)}^{zx}(q_1q_2,q_1'q_2';z;B)$

Pseudo-Skalare der ebenen Punktgruppe des betrachteten Systems sind.

Wenigstens für symmorphe Raumgruppen läßt sich weiter schließen: Liegen die (ebenen) Argument-Vektoren q_i und q_i' auf ein und derselben Spiegelgeraden der ebenen Punktgruppe, so sind die Skalare gerade, die Pseudo-Skalare aber ungerade Funktionen der Projektion des Magnetfeldes B auf die zugehörige Spiegelebene (d.h. die Ebene die von der x_3-Achse und der Spiegelgeraden gebildet wird).

Verschwindet diese Projektion, so verschwinden auch die pseudo-skalaren Größen.

---

*) Die Beziehungen sind umkehrbar, und es gilt

$$\chi_{j_1j_2j_3}(q,q';z) = q_{1\nu}/q_{1\mu}\,\chi_{j_\rho j_2 j_3}(q,q';z)\,q_{3\nu}'/q_{1\mu}' + q_{1\nu}/q_{1\mu}\,\chi_{j_\rho j_2 j_5}(q,q';z)\,q_{3\nu}'/q_{1\mu}' + q_{1\nu}/q_{1\mu}\,\chi_{j_\rho j_3 j_\sigma}(q,q';z)\,q_{3\nu}'/q_{1\mu}' + q_{1\nu}/q_{1\mu}\,\chi_{j_\rho j_5 j_\sigma}(q,q';z)\,q_{3\nu}'/q_{1\mu}'$$

$$\chi_{j_1j_2j_3}(q,q';z) = q_{1\nu}/q_{1\mu}\,\chi_{j_\rho j_2 j_3}(q,q';z) + q_{1\nu}/q_{1\mu}\,\chi_{j_\rho j_5 j_3}(q,q';z)$$

$$\chi_{j_1j_2j_3}(q,q';z) = \chi_{j_1 j_2 j_\rho}(q,q';z)\,q_{3\nu}'/q_{1\mu}' + \chi_{j_1 j_2 j_5}(q,q';z)\,q_{3\nu}'/q_{1\mu}'$$

6. Besitzt das System senkrecht zur x_3-Achse eine periodische Struktur, also eines der fünf Punktnetze mit der Elementarzelle F_o *), so gilt mit $q = \bar{q} + \underline{Q}$ und $q' = \bar{q}' + \underline{Q}'$ (q, q' reduzierte, $\underline{Q}, \underline{Q}'$ reziproke Gittervektoren) z.B.

$$\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(\bar{q}_1+Q_1, \bar{q}_2+Q_2; \bar{q}_1'+Q_1', \bar{q}_2'+Q_2'; z) = \delta_{\bar{q}_1\bar{q}_1'}\delta_{\bar{q}_2\bar{q}_2'}\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(\bar{q}_1+Q_1, \bar{q}_2+Q_2; \bar{q}_1+Q_1', \bar{q}_2+Q_2'; z) \qquad (7.6)$$

oder definitorisch

$$\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(\bar{q}_1+Q_1, \bar{q}_2+Q_2; \bar{q}_1'+Q_1', \bar{q}_2'+Q_2'; z) = L^2/F_o\, \delta_{\bar{q}_1\bar{q}_1'}\delta_{\bar{q}_2\bar{q}_2'}\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(\bar{q}_1\bar{q}_2 z; Q_1Q_2, Q_1'Q_2'). \qquad (7.7)$$

Dabei hat man zweckmäßig neue Größen durch Herausziehen eines Faktors $L^2/F_o\, \delta_{\bar{q}_1\bar{q}_1'}\delta_{\bar{q}_2\bar{q}_2'}$ definiert, nämlich

$$\mathcal{T}^{ss}_{(1)}(\bar{q}_1\bar{q}_2 z; Q_1Q_2, Q_1'Q_2') := F_o\,\delta_{Q_1Q_1'}\delta_{Q_2Q_2'} - \tfrac{Z}{c}\lambda \cdot \tfrac{1}{2c} \cdot \tfrac{1}{iz}\{\chi_{j_s j_s}(\bar{q}_1\bar{q}_2\lambda\lambda z; Q_1Q_2, Q_1'Q_2') - \omega_p^2(\bar{q}_1\bar{q}_2\lambda\lambda\, Q_1Q_2, Q_1'Q_2')_{s}\}$$
(7.8)

mit

$$\chi_{j_\Delta j_\Delta'}(\bar{q}_1\bar{q}_2 q_3 q_3' z; Q_1Q_2, Q_1'Q_2') := \int_{F_o} dx_1' dx_2'\, e^{-i(Q_i - Q_i')x_i'} \int d(x_1-x_1')\, d(x_2-x_2')\, e^{-i(\bar{q}_i+Q_i)(x_i-x_i')} \int dx_3 \int dx_3'\, e^{-iq_3x_3 - iq_3'x_3'}\, \chi_{j_\Delta j_\Delta'}(r, r'; z)$$
(7.9)

und analog für die anderen 15 Koeffizienten.

Jetzt hat man statt der gekoppelten Integralgln. (3.1) gekoppelte Matrix-Gln.

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_p^{(1)}(\bar{q}_1+Q_1\, \bar{q}_2+Q_2\, x_3\, \omega) = {} & \mathcal{E}_p^{(1)}(\bar{q}_1+Q_1\, q_2+Q_2\, \omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3} \\ & + 1/F_o \sum_{Q_1'Q_2'} \{\mathcal{Q}^{pp}_{(1)}(\bar{q}_1\bar{q}_2\omega; Q_1Q_2, Q_1'Q_2')\,\mathcal{E}_p^{(1)}(\bar{q}_1+Q_1'\, q_2+Q_2'\, \omega)_{in} \\ & + \mathcal{Q}^{ps}_{(1)}(\bar{q}_1\bar{q}_2\omega, Q_1Q_2, Q_1'Q_2')\,\mathcal{E}_s^{(1)}(\bar{q}_1+Q_1'\, \bar{q}_2+Q_2'\, \omega)_{in} \\ & + \mathcal{T}^{pp}_{(2)}(\bar{q}_1\bar{q}_2\omega; Q_1Q_2, Q_1'Q_2')\,\mathcal{E}_p^{(2)}(\bar{q}_1+Q_1'\, \bar{q}_2+Q_2'\, \omega)_{in} \\ & + \mathcal{T}^{ps}_{(2)}(\bar{q}_1\bar{q}_2\omega; Q_1Q_2, Q_1'Q_2')\,\mathcal{E}_s^{(2)}(\bar{q}_1+Q_1'\, \bar{q}_2+Q_2'\, \omega)_{in}\}\, e^{-i\lambda' x_3}\end{aligned} \qquad (7.10)$$

usw.

---

*) Der Fall eindimensionaler Periodizität (z.B. durch ein "grating") kann als Grenzfall mit subsumiert werden.

Das elektromagnetische Feld kann, wie man sagt, nur noch Impulse $\underline{Q}$ in den x_1- und x_2-Richtungen (und die damit verknüpften Impulse in x_3-Richtung) an den ebenen Kristall abgeben.

Diese "Umklapp"-Komponenten der RTK sollten neben der "Normal"-Komponente nur dann in Erscheinung treten, wenn mit Feldern experimentiert wird, die über eine Strecke $\sqrt{F_0}$ merklich variieren. Ist F_0 gegeben durch die atomistische Struktur, so ist $\sqrt{F_0} \approx 10^{-8}$ cm; es wäre also an Untersuchungen mit Röntgenlicht zu denken. Dagegen sind typische Werte für die Periodenlänge einer grating-Struktur, wie sie zur Ausmessung der Dispersions-Relation von Oberflächen verwandt wird,[6] $\sqrt{F_0} \approx 10^{-3}$ cm. Das entspricht schon der Wellenlänge von Infrarot-Licht.

II.
8. Reflexion und Transmission "in erster Ordnung"

Im folgenden sollen Situationen wie die geschilderten, wo die "Umklapp"-Komponenten der RTK wichtig werden, grundsätzlich ausgespart werden. Reflexion und Transmission sollen nur "in erster Ordnung" beobachtet werden.

Wenn man jetzt wieder einfach q_i statt $\bar{q}_i$ schreibt, da Wellenvektoren außerhalb der Brillouin-Zone nicht mehr vorkommen, lauten die Gln. (3.1) oder Gln. (7.10) einfach

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_p^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) = {} & \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} e^{i\lambda x_3} \\ & + \{ \mathcal{R}_{(1)}^{pp}(q_1 q_2 \omega)\, \mathcal{E}_p^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} + \mathcal{R}_{(1)}^{ps}(q_1 q_2 \omega)\, \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 \omega)_{in} \\ & + \Gamma_{(2)}^{ps}(q_1 q_2 \omega)\, \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in} + \Gamma_{(2)}^{ps}(q_1 q_2 \omega)\, \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in} \} e^{-i\lambda x_3} \end{aligned} \qquad (8.1a)$$

$$\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{i\lambda x_3}$$
$$+\{\mathcal{R}_{(1)}^{sp}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_p^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in} + \mathcal{R}_{(1)}^{ss}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}$$
$$+\mathcal{T}_{(2)}^{sp}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in} + \mathcal{T}_{(2)}^{ss}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\}\, e^{-i\lambda x_3}$$

$$\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3-a)}$$
$$+\{\mathcal{R}_{(2)}^{pp}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in} + \mathcal{R}_{(2)}^{ps}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}$$
$$+\mathcal{T}_{(1)}^{pp}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_p^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in} + \mathcal{T}_{(1)}^{ps}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\}\, e^{i\lambda(x_3-a)}$$

$$\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2x_3\omega) = \mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}\, e^{-i\lambda(x_3-a)}$$
$$+\{\mathcal{R}_{(1)}^{sp}(q_1q_2\omega)\;\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in} + \mathcal{R}_{(2)}^{ss}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1q_2\omega)_{in}$$
$$+\mathcal{T}_{(1)}^{sp}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_p^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in} + \mathcal{T}_{(1)}^{ss}(q_1q_2\omega)\,\mathcal{E}_s^{(1)}(q_1q_2\omega)_{in}\}\, e^{i\lambda(x_3-a)}$$

(8.1b-d)

Statt der Gln. (3.4) bzw. Gln. (7.8) hat man nun

$$\mathcal{R}_{(1)}^{pp}(q_1q_2z) = -\frac{c\lambda}{2}\cdot\frac{1}{2c}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_p}j_p^*(q_1q_2-\lambda\lambda z) - \omega_p^2(-\lambda\lambda)$$
$$-\chi_{j_p}j_3^*(q_1q_2-\lambda\lambda z)^{q_{11}/\lambda} + q_{11}/\lambda\,\chi_{j_3}j_p^*(q_1q_2-\lambda\lambda z)$$
$$-q_{11}/\lambda\,(\chi_{j_3}j_3^*(q_1q_2-\lambda\lambda z) - \omega_p^2(-\lambda\lambda))^{q_{11}/\lambda}\}$$

$$\mathcal{R}_{(1)}^{ps}(q_1q_2z) = -\frac{c\lambda}{2}\cdot\frac{1}{2c}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_p}j_s^*(q_1q_2-\lambda\lambda z) + q_{11}/\lambda\,\chi_{j_3}j_s^*(q_1q_2-\lambda\lambda z)\}$$

$$\mathcal{R}_{(1)}^{sp}(q_1q_2z) = -\frac{z}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_s}j_p^*(q_1q_2-\lambda\lambda z) - \chi_{j_s}j_3^*(q_1q_2-\lambda\lambda z)^{q_{11}/\lambda}\}$$

$$\mathcal{R}_{(1)}^{ss}(q_1q_2z) = -\frac{z}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_s}j_s^*(q_1q_2-\lambda\lambda z) - \omega_p^2(-\lambda\lambda)\}$$

$$\mathcal{R}_{(2)}^{pp}(q_1q_2z) = -\frac{c\lambda}{2}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_p}j_p^*(q_1q_2\lambda-\lambda z) - \omega_p^2(\lambda-\lambda)$$
$$+\chi_{j_p}j_3^*(q_1q_2\lambda-\lambda z)^{q_{11}/\lambda} - q_{11}/\lambda\,\chi_{j_3}j_p^*(q_1q_2\lambda-\lambda z)$$
$$-q_{11}/\lambda\,(\chi_{j_3}j_3^*(q_1q_2\lambda-\lambda z) - \omega_p^2(\lambda-\lambda))^{q_{11}/\lambda}\}\, e^{i\lambda a}$$

$$\mathcal{R}_{(2)}^{ps}(q_1q_2z) = -\frac{c\lambda}{2}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_p}j_s^*(q_1q_2\lambda-\lambda z) - q_{11}/\lambda\,\chi_{j_3}j_s^*(q_1q_2\lambda-\lambda z)\}\, e^{i\lambda a}$$

$$\mathcal{R}_{(2)}^{sp}(q_1q_2z) = -\frac{z}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_s}j_p^*(q_1q_2\lambda-\lambda z) + \chi_{j_s}j_3^*(q_1q_2\lambda-\lambda z)^{q_{11}/\lambda}\}\, e^{i\lambda a}$$

$$\mathcal{R}_{(2)}^{ss}(q_1q_2z) = -\frac{z}{c\lambda}\cdot\frac{1}{2c}\cdot e^{i\lambda a}\cdot\frac{1}{iz}\{\chi_{j_s}j_s^*(q_1q_2\lambda-\lambda z) - \omega_p^2(\lambda-\lambda)\}\, e^{i\lambda a}$$

(8.2a-h)

$$T^{ee}_{(2)}(q_1q_2z) = e^{i\lambda a} \cdot c\lambda/2 \cdot 1/2c \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^r j_1^\rho}(q_1q_2-\lambda-\lambda z) - \omega_\rho^2(-\lambda-\lambda)$$
$$+ \chi_{j_1^r j_1^3}(q_1q_2-\lambda-\lambda z)^{q_m/\lambda} - {}^{q_m/\lambda} \chi_{j_1^3 j_1^\rho}(q_1q_2-\lambda-\lambda z)$$
$$+ {}^{q_m/\lambda}\big(\chi_{j_1^3 j_1^3}(q_1q_2-\lambda-\lambda z) - \omega_\rho^2(-\lambda-\lambda)\big)^{q_m/\lambda}\Big\} e^{i\lambda a}$$

$$T^{es}_{(2)}(q_1q_2z) = -c\lambda/2 \cdot 1/2c \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^\rho j_1^5}(q_1q_2-\lambda-\lambda z) + {}^{q_m/\lambda}\chi_{j_1^5 j_1^5}(q_1q_2-\lambda-\lambda z)\Big\} e^{i\lambda a}$$

$$T^{se}_{(2)}(q_1q_2z) = -z/c\lambda \cdot 1/2c \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^5 j_1^r}(q_1q_2-\lambda-\lambda z) + \chi_{j_1^5 j_1^5}(q_1q_2-\lambda-\lambda z)^{q_m/\lambda}\Big\} e^{i\lambda a}$$

$$T^{ss}_{(2)}(q_1q_2z) = e^{i\lambda a} \cdot z/c\lambda \cdot 1/2c \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^5 j_1^5}(q_1q_2-\lambda-\lambda z) - \omega_\rho^2(-\lambda-\lambda)\Big\} e^{i\lambda a}$$

$$T^{ee}_{(2)}(q_1q_2z) = e^{i\lambda a} \cdot c\lambda/2 \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^r j_1^\rho}(q_1q_2\lambda\lambda z) - \omega_\rho^2(\lambda\lambda)$$
$$- \chi_{j_1^r j_1^5}(q_1q_2\lambda\lambda z)^{q_m/\lambda} - {}^{q_m/\lambda}\chi_{j_1^5 j_1^\rho}(q_1q_2\lambda\lambda z)$$
$$+ {}^{q_m/\lambda}\big(\chi_{j_1^5 j_1^5}(q_1q_2\lambda\lambda z) - \omega_\rho^2(\lambda\lambda)\big)^{q_m/\lambda}\Big\}$$

$$T^{es}_{(2)}(q_1q_2z) = -c\lambda/2 \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^\rho j_1^5}(q_1q_2\lambda\lambda z) - {}^{q_m/\lambda}\chi_{j_1^5 j_1^5}(q_1q_2\lambda\lambda z)\Big\}$$

$$T^{se}_{(2)}(q_1q_2z) = -z/c\lambda \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^5 j_1^r}(q_1q_2\lambda\lambda z) - \chi_{j_1^5 j_1^5}(q_1q_2\lambda\lambda z)^{q_m/\lambda}\Big\}$$

$$T^{ss}_{(2)}(q_1q_2z) = e^{i\lambda a} \cdot z/c\lambda \cdot 1/2c \cdot e^{i\lambda a} \cdot 1/iz \Big\{ \chi_{j_1^5 j_1^5}(q_1q_2\lambda\lambda z) - \omega_\rho^2(\lambda\lambda)\Big\} \qquad (8.2i\text{-}p)$$

Dabei ist - Gl. (3.2) und Gl. (7.9) -

$$\chi_{j_1^r j_1^\nu}(q_1q_2q_3q_3';z) := \int du_1 du_2 e^{-iq_1u_1}\Big\{dx_3 dx_3' e^{-iq_3x_3} e^{iq_3'x_3'} \cdot 1/F_0 \int_{F_0} dx_1' dx_2' \chi_{j_1^r j_1^\nu}(u_1+x_1'u_1+x_2'x_3,x_1'x_2'x_3';z)$$
$$\equiv 1/F_0 \chi_{j_1^r j_1^\nu}(q_1q_2q_3q_3';Q_1=0\,Q_2=0;Q_1'=0\,Q_2'=0)$$
$$\equiv 1/L^2 \chi_{j_1^r j_1^\nu}(q_1q_2q_3,q_1q_2q_3';z) \qquad (8.3)$$

$$\omega_\rho^2(q_3q_3')_{\mu\nu} := \int dx_3 e^{-i(q_3-q_3')x_3} \cdot 1/F_0 \int_{F_0} dx_1 dx_2\ \omega_\rho^2(x_1x_2x_3)\cdot\delta_{\mu\nu}$$
$$\equiv 1/F_0\ \omega_\rho^2(q_3q_3';Q_1=0\,Q_2=0;Q_1'=0\,Q_2'=0)_{\mu\nu}$$
$$\equiv 1/L^2\ \omega_\rho^2(q_1q_2q_3,q_1q_2q_3')_{\mu\nu} \qquad (8.4)$$

In seiner elektromagnetischen Wirkung auf die asymptotischen Außenräume erscheint das System als homogen in x_1- und x_2-Richtung. In den Stromdichte-Korrelationsfunktionen $\chi_{j_1^r j_1^\nu}(q_1q_2q_3q_3'z)$ ist natürlich der Effekt der (zweidimensional-periodischen) lokalen Feldkorrekturen, der sich in der Beimischung höherer Q_i äußert, im wesentlichen erhalten.

9. Energie-Bilanz (Definitheits-Aussagen)

Wie oben diskutiert, muß die Differenz

$$\Delta E := S^{(1)} - S^{(2)}$$

als die totale Energie-Aufnahme des Systems (der Schicht) positiv sein.*) Da die $q_1 q_2 \omega$-Komponenten von einander unabhängig sind,- bis auf die Forderung $\mathcal{E}(q_1 q_2 x_3 \omega) = \mathcal{E}(-q_1 - q_2 x_3 - \omega)^*$ - folgt

$$\Delta E = 1/L^2 \sum_{q_1 q_2} 1/2\pi \int d\omega \, \Delta E(q_1 q_2 \omega). \tag{9.1}$$

Dabei ist die Energie-Aufnahme des Systems aus der $q_1 q_2 \omega$-Kompinente des Feldes $\Delta E(q_1 q_2 \omega)$ gegeben durch:

$$\Delta E = \begin{bmatrix} \mathcal{E}^{(1)*}_{P\,in} \\ \mathcal{E}^{(2)*}_{P\,in} \\ \mathcal{E}^{(1)*}_{S\,in} \\ \mathcal{E}^{(2)*}_{S\,in} \end{bmatrix}^t \frac{1}{2} \left\{ \begin{bmatrix} W^{PP}_{(11)} & W^{PP}_{(12)} & W^{PS}_{(11)} & W^{PS}_{(12)} \\ W^{PP}_{(21)} & W^{PP}_{(22)} & W^{PS}_{(21)} & W^{PS}_{(22)} \\ W^{SP}_{(11)} & W^{SP}_{(12)} & W^{SS}_{(11)} & W^{SS}_{(12)} \\ W^{SP}_{(21)} & W^{SP}_{(22)} & W^{SS}_{(21)} & W^{SS}_{(22)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} W^{PP}_{(11)} & W^{PP}_{(12)} & W^{PS}_{(11)} & W^{PS}_{(12)} \\ W^{PP}_{(21)} & W^{PP}_{(22)} & W^{PS}_{(21)} & W^{PS}_{(22)} \\ W^{SP}_{(11)} & W^{SP}_{(12)} & W^{SS}_{(11)} & W^{SS}_{(12)} \\ W^{SP}_{(21)} & W^{SP}_{(22)} & W^{SS}_{(21)} & W^{SS}_{(22)} \end{bmatrix}^+ \right\} \begin{bmatrix} \mathcal{E}^{(1)}_{P\,in} \\ \mathcal{E}^{(2)}_{P\,in} \\ \mathcal{E}^{(1)}_{S\,in} \\ \mathcal{E}^{(2)}_{S\,in} \end{bmatrix} \tag{9.2}$$

Die Komponenten sind im einzelnen

$$W^{PP}_{(11)} = \Theta(\omega^2 - c^2 q_\parallel^2) \cdot c \left\{ \omega/2\lambda (1 - |R^{PP}_{(1)}|^2 - |T^{PP}_{(1)}|^2) - c\lambda/\omega (|R^{SP}_{(1)}|^2 + |T^{SP}_{(1)}|^2) \right\}$$
$$- \Theta(c^2 q_\parallel^2 - \omega^2) \cdot c \left\{ \omega/c\lambda |\lambda| - 2\,\mathrm{Im}\, R^{PP}_{(1)} \right\}$$

$$W^{PP}_{(12)} = \Theta(\omega^2 - c^2 q_\parallel^2) \cdot c \left\{ -\omega/2\lambda (R^{PP*}_{(1)} T^{PP}_{(2)} + T^{PP*}_{(1)} R^{PP}_{(2)}) - c\lambda/\omega (R^{SP*}_{(1)} T^{SP}_{(2)} + T^{SP*}_{(1)} R^{SP}_{(2)}) \right\}$$
$$- \Theta(c^2 q_\parallel^2 - \omega^2) \cdot c \left\{ \omega/2\lambda (T^{PP}_{(1)} - T^{PP*}_{(1)}) \right\}$$

$$W^{PP}_{(21)} = \Theta(\omega^2 - c^2 q_\parallel^2) \cdot c \left\{ -\omega/2\lambda (T^{PP*}_{(2)} R^{PP}_{(1)} + R^{PP*}_{(2)} T^{PP}_{(1)}) - c\lambda/\omega (T^{SP*}_{(2)} R^{SP}_{(1)} + R^{SP*}_{(2)} T^{SP}_{(1)}) \right\}$$
$$- \Theta(c^2 q_\parallel^2 - \omega^2) \cdot c \left\{ \omega/2\lambda (T^{PP}_{(1)} - T^{PP*}_{(2)}) \right\} \tag{9.3}$$

usw.

Aus der positiven Definitheit der Form $\Delta E(q_1 q_2 \omega)$ folgt, daß die Haupt-Unterdeterminanten des hermiteschen Teils der Matrix W positiv sein müssen - insbesondere die

---

*) Streifende Inzidenz $(\omega^2 = c^2 q_\parallel^2)$ ist wieder auszuschließen (cf.p.10

Diagonal-Komponenten. Hieraus folgen Definitheits-Aussagen über die Stromdichte-Korrelationsfunktionen, die über die bekannte Aussage

$$\omega\,\chi''_{\mu\nu}(r,r';\omega) \quad \text{positiv-definit}$$

hinausgehen. Allerdings sind sie zu kompliziert, wenn nicht weitere Symmetrien für Vereinfachung sorgen.

Bei Verschwinden der Pseudo-Skalare $\sim q_i$ etc. hat man z.B. die vertraute Aussage:

$$|\mathcal{Q}^{pp}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{pp}_{(\omega)}|^2 \leq 1 \qquad (\omega^2 > c^2q^2)$$

$$|\mathcal{Q}^{ss}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{ss}_{(\omega)}|^2 \leq 1 \qquad " \qquad (9.4a\text{-}b)$$

bzw. im allgemeinen

$$|\mathcal{Q}^{pp}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{pp}_{(\omega)}|^2 + (c\lambda/\omega)^2(|\mathcal{Q}^{sp}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{sp}_{(\omega)}|^2) \leq 1 \qquad (\omega^2 > c^2q^2)$$

$$|\mathcal{Q}^{ss}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{ss}_{(\omega)}|^2 + (\omega/c\lambda)^2(|\mathcal{Q}^{ps}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{ps}_{(\omega)}|^2) \leq 1 \qquad " \qquad (9.5a\text{-}b)$$

Es ist ein Nachteil der Gl. (9.2) für $\Delta E(q_1q_2\omega)$, daß sich die Matrix W nicht analytisch in die komplexe Frequenz-Ebene fortsetzen läßt. Weiter unten soll $\Delta E(q_1q_2\omega)$ durch eine andere (bilineare) Form gegeben werden, deren Matrix diesen Mangel nicht aufweist.

10. Symmetrie-Aussagen

Die Symmetrie-Beziehungen, wie sie oben abgehandelt worden sind, vereinfachen sich wegen $q'_i = q_i$:

1. Aus der Realität des elektromagnetischen Feldes folgt nun

$$\mathcal{Q}^{pp}_{(\omega)}(q_1q_2,-z^*) = \mathcal{Q}^{pp}_{(\omega)}(-q_1,-q_2,z)^*$$

$$\mathcal{Q}^{ps}_{(\omega)}(q_1q_2,-z^*) = \mathcal{Q}^{ps}_{(\omega)}(-q_1,-q_2,z)^* \qquad (10.1a\text{-}h)$$

usw. bis

$$\mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 , -z^*) = \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(-q_1 - q_2 , z)^*$$

entsprechend der Beziehung für die Korrelationsfunktionen

$$\chi_{j_1 j_2 j_3}(q_1 q_3 q_3' , -z^*) = \chi_{j_1 j_2 j_3}(-q_1 - q_3^* - q_3'^* , z)^*$$

2. Den Zusammenhang zwischen retardierten und avancierten Funktionen liefert eine Symmetrie-Relation gegenüber Spiegelung an der reellen Frequenz-Achse:

$$\chi_{j_1 j_2 j_3}(q_1 q_3^* q_3'^* ; z^*) = \chi_{j_1 j_2 j_3}(q_1 q_3 q_3 ; z)^*$$

und folglich ($i = 1,2$)

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z^*) &= \mathcal{Q}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z)^* \\
z^*/c\lambda^* \, \mathcal{Q}^{ps}_{(i)}(q_1 q_2 z^*) &= (c\lambda/z \, \mathcal{Q}^{sp}_{(i)}(q_1 q_2 z))^* \\
\mathcal{Q}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z^*) &= \mathcal{Q}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z)^* \\
\\
\mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z^*) &= \mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z)^* \\
z^*/c\lambda^* \, \mathcal{T}^{ps}_{(i)}(q_1 q_2 z^*) &= (c\lambda/z \, \mathcal{T}^{sp}_{(i)}(q_1 q_2 z))^* \\
\mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z^*) &= \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z)^*
\end{aligned} \qquad (10.2a\text{-}f)$$

3. Aus der Zeitumkehr-Invarianz des Systems folgt

$$\chi_{j_1 j_2 j_3}(q_1 q_3 q_3' , z ; \mathcal{B}) = \chi_{j_1 j_2 j_3}(-q_1 - q_3' - q_3 , z ; -\mathcal{B})$$

und somit ($i,j = 1,2 \wedge i \neq j$):

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z ; \mathcal{B}) &= \mathcal{Q}^{pp}_{(i)}(-q_1 - q_2 z ; -\mathcal{B}) \\
z/c\lambda \, \mathcal{Q}^{ps}_{(i)}(q_1 q_2 z ; \mathcal{B}) &= c\lambda/z \, \mathcal{Q}^{sp}_{(i)}(-q_1 - q_2 z ; -\mathcal{B}) \\
\mathcal{Q}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z ; \mathcal{B}) &= \mathcal{Q}^{ss}_{(i)}(-q_1 - q_2 z ; -\mathcal{B}) \\
\\
\mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z , \mathcal{B}) &= \mathcal{T}^{pp}_{(j)}(-q_1 - q_2 z ; -\mathcal{B}) \\
z/c\lambda \, \mathcal{T}^{ps}_{(i)}(q_1 q_2 z ; \mathcal{B}) &= c\lambda/z \, \mathcal{T}^{sp}_{(j)}(-q_1 - q_2 z ; -\mathcal{B}) \\
\mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z ; \mathcal{B}) &= \mathcal{T}^{ss}_{(j)}(-q_1 - q_2 z ; -\mathcal{B})
\end{aligned} \qquad (10.3a\text{-}f)$$

4. Aus der Symmetrie des Systems gegen Spiegelung an der Mittelebene $x_3 = a/2$ folgt

$$\chi_{j_\nu j_\mu}(q_1 q_2 q_3' z; B_1 B_3) = (-1)^\nu (-1)^\mu e^{-iq_3 a}\, \chi_{j_\nu j_\mu}(q_1, -q_2, q_3' z; -B_1 B_3)\, e^{iq_3' a}$$

und weiter

$$\mathcal{R}^{PP}_{(1)}(q_1 q_2 z; B_1 B_3) = \mathcal{R}^{PP}_{(1)}(q_1 q_2 z; -B_1 B_3)$$

$$\mathcal{R}^{PS}_{(1)}(q_1 q_2 z; B_1 B_3) = \mathcal{R}^{PS}_{(1)}(q_1 q_2 z; -B_1 B_3) \qquad (10.4a-h)$$

usw. bis

$$\mathcal{T}^{SS}_{(1)}(q_1 q_2 z; B_1 B_3) = \mathcal{T}^{SS}_{(1)}(q_1 q_2 z; -B_1 B_3)$$

5. Wie schon oben diskutiert, sind die fünf Größen

$$\chi_{j_4 j_1}(q_1 q_3 q_3' z) - q_1 q_3' / q_\parallel^2\, \chi_{j_1 j_2}(q_1 q_3 q_3' z) \qquad \chi_{j_3 j_5}(q_1 q_3 q_3' z) - q_1^S q_3^S / q_\parallel^2\, \chi_{j_1 j_2}(q_1 q_3 q_3' z)$$

$$\chi_{j_4 j_1}(q_1 q_3 q_3' z) - q_1 / q_\parallel\, \chi_{j_1 j_3}(q_1 q_3 q_3' z) \qquad \chi_{j_3 j_4}(q_1 q_3 q_3' z) - q_3' / q_\parallel\, \chi_{j_2 j_3}(q_1 q_3 q_3' z)$$

$$\chi_{j_2 j_5}(q_1 q_3 q_3' z) \qquad (10.5a)$$

Skalare und die vier Größen

$$\chi_{j_4 j_5}(q_1 q_3 q_3' z) - q_1 q_3^S / q_\parallel^2\, \chi_{j_2 j_4}(q_1 q_3 q_3' z) \qquad \chi_{j_2 j_4}(q_1 q_3 q_3' z) - q_1^S q_3' / q_\parallel^2\, \chi_{j_4 j_2}(q_1 q_3 q_3' z)$$

$$\chi_{j_5 j_3}(q_1 q_3 q_3' z) - q_1^S / q_\parallel\, \chi_{j_1 j_2}(q_1 q_3 q_3' z) \qquad \chi_{j_3 j_5}(q_1 q_3 q_3' z) - q_3^S / q_\parallel\, \chi_{j_2 j_2}(q_1 q_3 q_3' z) \qquad (10.5b)$$

Pseudo-Skalare der "ebenen Punktgruppe" des Systems.

Entsprechend hat man die acht Skalare

$$\mathcal{R}^{PP}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ \mathcal{R}^{SS}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ \mathcal{T}^{PP}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ \mathcal{T}^{SS}_{(i)}(q_1 q_2 z; B)$$

und die acht Pseudo-Skalare

$$\mathcal{R}^{PS}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ \mathcal{R}^{SP}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ \mathcal{T}^{PS}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ \mathcal{T}^{SP}_{(i)}(q_1 q_2 z; B).$$

Liegt der (ebene) Argument-Vektor q_i auf einer Spiegelgeraden,*) sind die skalaren Größen gerade, die pseudoskalaren aber ungerade Funktionen der Projektion des Magnetfeldes B auf jene die x_3-Achse enthaltende Spiegelebene, deren Spur in der x_1,x_2-Ebene die Spiegelge-

---

*) Symmorphie der (ebenen) Raumgruppe ist, anders als oben, jetzt nicht mehr erforderlich.

rade definiert.*) Verschwindet diese Projektion, so auch die pseudo-skalaren Größen. In diesem Fall sind die p-polarisierten Felder (TM-Felder) entkoppelt von den s-polarisierten Feldern (TE-Felder).

III. 11. Strikte Definition der Oberflächen-Impedanz

Alternativ zu dem hier entwickelten Formalismus der linearen RTK wird in der Literatur der Begriff der Oberflächen-Impedanz herangezogen, um die elektromagnetische Wirkung einer Schicht auf den Außenraum zusammenzufassen. Allerdings ist anscheinend eine strikte Definition und Rechtfertigung dieses Begriffs der Oberflächen-Impedanz als einer Eigenschaft des Systems nicht vorgelegt, abgesehen davon, daß man durchgehend das Modell scharfer Oberflächen zu Grunde legt.

Es schälen sich jedoch zwei wesentliche Momente heraus, die in jeder Konzeption der Oberflächen-Impedanz enthalten sein sollten: (i) die Oberflächen-Impedanz verknüpft linear die Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes "auf dem Rand" mit den Tangentialkomponenten des magnetischen Feldes dort; (ii) der hermitesche Teil der Oberflächen-Impedanz beschreibt den Energiestrom aus dem Außenraum in die Schicht. Es wird sich im folgenden erweisen, daß man mit Hilfe der RTK der "Schicht" $\mathcal{R}^{\alpha\alpha}_{(i)}(q_1 q_2 z; \mathcal{B})$ etc. für beide "Oberflächen"

---

*) Mit anderen Worten: gerade bzw. ungerade Funktionen von (B_p, B_z)

einen 2-Pseudo-Tensor der Oberflächen-Impedanz definieren kann, der die Eigenschaften (·) und (‖) besitzt und in gewissem Sinne als Eigenschaft der "Schicht" angesehen werden kann.

Besäße nämlich die Schicht bei $x_3 = 0$ einen scharfen (unteren) Rand, so daß der Bereich $x_3 < 0$ von Vakuum erfüllter "Außenraum" wäre, so stimmten dort die asymptotischen Felder $\mathcal{E}_p^{(i)}(q_1 q_2 x_3 \omega)$ und $\mathcal{E}_s^{(i)}(q_1 q_2 x_3 \omega)$ mit den wahren Feldwerten überein. In Ermangelung einer wirklichen Oberfläche der Schicht sollen deshalb die Feldwerte auf der "Ersatz-Oberfläche" $x_3 = 0$ wie $\mathcal{E}_p^{(i)}(q_1 q_2 0 \omega)$, $\mathcal{E}_s^{(i)}(q_1 q_2 0 \omega)$ und $\mathcal{H}_s^{(i)}(q_1 q_2 0 \omega)$, $\mathcal{H}_p^{(i)}(q_1 q_2 0 \omega)$ "fiktive Randwerte" "$\mathcal{E}_p(q_1 q_2 0 \omega)$", "$\mathcal{E}_s(q_1 q_2 0 \omega)$" und "$\mathcal{H}_s(q_1 q_2 0 \omega)$", "$\mathcal{H}_p(q_1 q_2 0 \omega)$" heißen.

Statt der Eingabe-Amplituden $\mathcal{E}_p^{(i)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$, $\mathcal{E}_p^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$, $\mathcal{E}_s^{(i)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$ und $\mathcal{E}_s^{(2)}(q_1 q_2 \omega)_{in}$ ließen sich auch diese fiktiven Randwerte als unabhängige Variable verwenden. Denn nach Gl. (8.1) sind beide Variablen-Sätze durch eine lineare Beziehung

$$\begin{bmatrix} \text{"}\mathcal{E}_p(x_3=0)\text{"} \\ \text{"}\mathcal{H}_s(x_3=0)\text{"} \\ \text{"}\mathcal{E}_s(x_3=0)\text{"} \\ \text{"}\mathcal{H}_p(x_3=0)\text{"} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + Q_{(1)}^{pp} & T_{(2)}^{pp} & Q_{(1)}^{ps} & T_{(2)}^{ps} \\ \omega/c\lambda\,(1 - Q_{(1)}^{pp}) & -\omega/c\lambda\, T_{(2)}^{pp} & -\omega/c\lambda\, Q_{(1)}^{ps} & -\omega/c\lambda\, T_{(2)}^{ps} \\ Q_{(1)}^{sp} & T_{(2)}^{sp} & 1 + Q_{(1)}^{ss} & T_{(2)}^{ss} \\ -c\lambda/\omega\, Q_{(1)}^{sp} & -c\lambda/\omega\, T_{(2)}^{sp} & c\lambda/\omega\,(1 - Q_{(1)}^{ss}) & -c\lambda/\omega\, T_{(2)}^{ss} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}_{p\,in}^{(1)} \\ \mathcal{E}_{p\,in}^{(2)} \\ \mathcal{E}_{s\,in}^{(1)} \\ \mathcal{E}_{s\,in}^{(2)} \end{bmatrix} \tag{11.1}$$

verknüpft, die eindeutig ist, da die Determinante der Matrix, nämlich

$$4\,(T_{(1)}^{pp}\, T_{(2)}^{ss} - T_{(1)}^{ps}\, T_{(2)}^{sp}),$$

als nicht-verschwindend angesehen werden kann.

Vermindert man die Zahl der unabhängigen Parameter durch Vorgabe der Verhältnisse

$$\eta_p := \frac{\mathcal{E}^{(2)}_{p\,in}}{\mathcal{E}^{(1)}_{p\,in}} \qquad \eta_s := \frac{\mathcal{E}^{(2)}_{s\,in}}{\mathcal{E}^{(1)}_{s\,in}} \quad *) \tag{11.2}$$

- z.B. einseitige Einstrahlung von unten: $\eta_p = \eta_s = 0$ -, so führt diese Bindung zu einer Relation zwischen den (fiktiven) Randwerten, wie sie ähnlich zur Definition der Oberflächen-Impedanz öfters herangezogen wird. **)8

Aus den nun gültigen Beziehungen

$$\begin{bmatrix} "\mathcal{E}_p(0)" \\ "\mathcal{E}_s(0)" \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+\mathcal{Q}^{pp}_{(1)}+\mathcal{T}^{pp}_{(2)}\eta_p & \mathcal{Q}^{ps}_{(1)}+\mathcal{T}^{ps}_{(2)}\eta_s \\ \mathcal{Q}^{sp}_{(1)}+\mathcal{T}^{sp}_{(2)}\eta_p & 1+\mathcal{Q}^{ss}_{(1)}+\mathcal{T}^{ss}_{(2)}\eta_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}^{(1)}_{p\,in} \\ \mathcal{E}^{(1)}_{s\,in} \end{bmatrix} \tag{11.3a}$$

$$\begin{bmatrix} "\mathcal{B}_s(0)" \\ "\mathcal{B}_p(0)" \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega/c\lambda\,(1-\mathcal{Q}^{pp}_{(1)}-\mathcal{T}^{pp}_{(2)}\eta_p) & -c/c\lambda\,(\mathcal{Q}^{ps}_{(1)}+\mathcal{T}^{ps}_{(2)}\eta_s) \\ -c/\omega\,(\mathcal{Q}^{sp}_{(1)}+\mathcal{T}^{sp}_{(2)}\eta_p) & c/\omega\,(1-\mathcal{Q}^{ss}_{(1)}-\mathcal{T}^{ss}_{(2)}\eta_s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}^{(1)}_{p\,in} \\ \mathcal{E}^{(1)}_{s\,in} \end{bmatrix} \tag{11.3b}$$

folgt nämlich, solange die zweite Matrix umkehrbar ***) ist, eine Relation

$$\begin{bmatrix} "\mathcal{E}_p(0)" \\ "\mathcal{E}_s(0)" \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{Z}^{pp}_{(1)} & \mathcal{Z}^{ps}_{(1)} \\ \mathcal{Z}^{sp}_{(1)} & \mathcal{Z}^{ss}_{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} "\mathcal{B}_s(0)" \\ "-\mathcal{B}_p(0)" \end{bmatrix}, \tag{11.4}$$

die den 2-Pseudo-Tensor der Oberflächen-Impedanz definiert als

$$\begin{bmatrix} \mathcal{Z}^{pp}_{(1)} & \mathcal{Z}^{ps}_{(1)} \\ \mathcal{Z}^{sp}_{(1)} & \mathcal{Z}^{ss}_{(1)} \end{bmatrix} := \frac{1}{(1-\mathcal{Q}^{pp}_{(1)}-\mathcal{T}^{pp}_{(2)}\eta_p)(1-\mathcal{Q}^{ss}_{(1)}-\mathcal{T}^{ss}_{(2)}\eta_s)-(\mathcal{Q}^{ps}_{(1)}+\mathcal{T}^{ps}_{(2)}\eta_s)(\mathcal{Q}^{sp}_{(1)}+\mathcal{T}^{sp}_{(2)}\eta_p)} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} 1+\mathcal{Q}^{pp}_{(1)}+\mathcal{T}^{pp}_{(2)}\eta_p & \mathcal{Q}^{ps}_{(1)}+\mathcal{T}^{ps}_{(2)}\eta_s \\ \mathcal{Q}^{sp}_{(1)}+\mathcal{T}^{sp}_{(2)}\eta_p & 1+\mathcal{Q}^{ss}_{(1)}+\mathcal{T}^{ss}_{(2)}\eta_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c\lambda/2\,(1-\mathcal{Q}^{ss}_{(1)}-\mathcal{T}^{ss}_{(2)}\eta_s) & 2/c\lambda\,(\mathcal{Q}^{ps}_{(1)}+\mathcal{T}^{ps}_{(2)}\eta_s) \\ c\lambda/2\,(\mathcal{Q}^{sp}_{(1)}+\mathcal{T}^{sp}_{(2)}\eta_p) & 2/c\lambda\,(1-\mathcal{Q}^{pp}_{(1)}-\mathcal{T}^{pp}_{(2)}\eta_p) \end{bmatrix} \tag{11.5}$$

---

*) Es muß gelten $\eta_{p/s}(q_1 q_2 \omega)^* = \eta_{p/s}(-q_1 - q_2 - \omega)$. p.3 Fußnote; im Hinblick auf die Fortsetzung in die komplexe Frequenz-Ebene: $\eta_{p/s}(q_1 q_2 z)^* = \eta_{p/s}(-q_1 - q_2 - z)^*$ und $\eta_{p/s}(q_1 q_2 z)^* = \eta_{p/s}(q_1 q_2 z)^*$ mit der Vereinbarung $\eta_{p/s}(q_1 q_2 \omega) := \eta_{p/s}(q_1 q_2 \omega + i\varepsilon)$. Faktisch sollen nur $\eta_{p/s}$ reell und konstant betrachtet werden.

**) Die hier vorgelegte Definition unterscheidet sich von

Mit denselben Überlegungen folgt für "Ersatz-Oberfläche" $x_3 = a$ die Definition einer Oberflächen-Impedanz gemäß

$$\begin{bmatrix} "E_P(a)" \\ "E_S(a)" \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z^{PP}_{(2)} & Z^{PS}_{(2)} \\ Z^{SP}_{(2)} & Z^{SS}_{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} "-\mathcal{B}_S(a)" \\ "\mathcal{B}_P(a)" \end{bmatrix} \qquad (11.6)$$

und

$$\begin{bmatrix} Z^{PP}_{(2)} & Z^{PS}_{(2)} \\ Z^{SP}_{(2)} & Z^{SS}_{(2)} \end{bmatrix} := \frac{1}{(1-Q^{PP}_{(2)}-\mathcal{T}^{PP}_{(1)}\eta_P^{-1})(1-Q^{SS}_{(2)}-\mathcal{T}^{SS}_{(1)}\eta_S^{-1})-(Q^{PS}_{(2)}+\mathcal{T}^{PS}_{(1)}\eta_S^{-1})(Q^{SP}_{(2)}+\mathcal{T}^{SP}_{(1)}\eta_P^{-1})}$$

$$\times \begin{bmatrix} 1+Q^{PP}_{(2)}+\mathcal{T}^{PP}_{(1)}\eta_P^{-1} & Q^{PS}_{(2)}+\mathcal{T}^{PS}_{(1)}\eta_S^{-1} \\ Q^{SP}_{(2)}+\mathcal{T}^{SP}_{(1)}\eta_P^{-1} & 1+Q^{SS}_{(2)}+\mathcal{T}^{SS}_{(1)}\eta_S^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c\lambda/z\,(1-Q^{SS}_{(2)}-\mathcal{T}^{SS}_{(1)}\eta_S^{-1}) & z/c\lambda\,(Q^{PS}_{(2)}+\mathcal{T}^{PS}_{(1)}\eta_S^{-1}) \\ c\lambda/z\,(Q^{SP}_{(2)}+\mathcal{T}^{SP}_{(1)}\eta_P^{-1}) & z/c\lambda\,(1-Q^{PP}_{(2)}-\mathcal{T}^{PP}_{(1)}\eta_P^{-1}) \end{bmatrix} \qquad (11.7)$$

---

den üblichen um einen Faktor 1/c bzw. $4\pi/c$. Hier ist die Oberflächen-Impedanz eine dimensionslose Größe.

***) Das erscheint aus physikalischen Gründen gewährleistet. In Spezialfällen kann man es einfach aus Definitheits-Aussagen herleiten.

Ausmultipliziert erhält man:

$$\begin{bmatrix} Z^{pp}_{(1)} & Z^{ps}_{(1)} \\ Z^{sp}_{(1)} & Z^{ss}_{(1)} \end{bmatrix} = \frac{1}{(1-Q^{pp}_{(1)}-T^{pp}_{(2)}\eta_p)(1-Q^{ss}_{(1)}-T^{ss}_{(2)}\eta_s)-(Q^{ps}_{(1)}+T^{ps}_{(2)}\eta_s)(Q^{sp}_{(1)}+T^{sp}_{(2)}\eta_p)} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} c\lambda/z\{(1+Q^{pp}_{(1)}+T^{pp}_{(2)}\eta_p)(1-Q^{ss}_{(1)}-T^{ss}_{(2)}\eta_s)+(Q^{ps}_{(1)}+T^{ps}_{(2)}\eta_s)(Q^{sp}_{(1)}+T^{sp}_{(2)}\eta_p)\} & z/c\lambda\cdot 2(Q^{ps}_{(1)}+T^{ps}_{(2)}\eta_s) \\ c\lambda/z\cdot 2(Q^{sp}_{(1)}+T^{sp}_{(2)}\eta_p) & z/c\lambda\{(1+Q^{ss}_{(1)}+T^{ss}_{(2)}\eta_s)(1-Q^{pp}_{(1)}-T^{pp}_{(2)}\eta_p)+(Q^{sp}_{(1)}+T^{sp}_{(2)}\eta_p)(Q^{ps}_{(1)}+T^{ps}_{(2)}\eta_s)\} \end{bmatrix} \qquad (11.8)$$

und

$$\begin{bmatrix} Z^{pp}_{(2)} & Z^{ps}_{(2)} \\ Z^{sp}_{(2)} & Z^{ss}_{(2)} \end{bmatrix} = \frac{1}{(1-Q^{pp}_{(2)}-T^{pp}_{(1)}\eta_p^{-1})(1-Q^{ss}_{(2)}-T^{ss}_{(1)}\eta_s^{-1})-(Q^{ps}_{(2)}+T^{ps}_{(1)}\eta_s^{-1})(Q^{sp}_{(2)}+T^{sp}_{(1)}\eta_p^{-1})} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} c\lambda/z\{(1+Q^{pp}_{(2)}+T^{pp}_{(1)}\eta_p^{-1})(1-Q^{ss}_{(2)}-T^{ss}_{(1)}\eta_s^{-1})+(Q^{ps}_{(2)}+T^{ps}_{(1)}\eta_s^{-1})(Q^{sp}_{(2)}+T^{sp}_{(1)}\eta_p^{-1})\} & z/c\lambda\cdot 2(Q^{ps}_{(2)}+T^{ps}_{(1)}\eta_s^{-1}) \\ c\lambda/z\cdot 2(Q^{sp}_{(2)}+T^{sp}_{(1)}\eta_p^{-1}) & z/c\lambda\{(1+Q^{ss}_{(2)}+T^{ss}_{(1)}\eta_s^{-1})(1-Q^{pp}_{(2)}-T^{pp}_{(1)}\eta_p^{-1})+(Q^{sp}_{(2)}+T^{sp}_{(1)}\eta_s^{-1})(Q^{ps}_{(2)}+T^{ps}_{(1)}\eta_s^{-1})\} \end{bmatrix} \qquad (11.9)$$

Verschwinden die pseudo-skalaren Größen $Q^{sp}_{(i)}$ u.ä. so folgt einfacher

$$Z^{pp}_{(1)} = \frac{c\lambda}{z}\,\frac{1+Q^{pp}_{(1)}+T^{pp}_{(2)}\eta_p}{1-Q^{pp}_{(1)}-T^{pp}_{(2)}\eta_p} \qquad Z^{ss}_{(1)} = \frac{z}{c\lambda}\,\frac{1+Q^{ss}_{(1)}+T^{ss}_{(2)}\eta_s}{1-Q^{ss}_{(1)}-T^{ss}_{(2)}\eta_s}$$

$$Z^{pp}_{(2)} = \frac{c\lambda}{z}\,\frac{1+Q^{pp}_{(2)}+T^{pp}_{(1)}\eta_p^{-1}}{1-Q^{pp}_{(2)}-T^{pp}_{(1)}\eta_p^{-1}} \qquad Z^{ss}_{(2)} = \frac{z}{c\lambda}\,\frac{1+Q^{ss}_{(2)}+T^{ss}_{(1)}\eta_s^{-1}}{1-Q^{ss}_{(2)}-T^{ss}_{(1)}\eta_s^{-1}} \qquad (11.10a\text{-}d)$$

Die anderen (pseudo-skalaren) Komponenten verschwinden.

Die vorgelegte Definition besitzt Eigenschaft (i) - jedenfalls in einem hier angemessenen erweiterten Sinn; sie besitzt auch Eigenschaft (ii), wie sich weiter unten zeigen wird. Allerdings ist diese Oberflächen-Impedanz wegen ihrer Abhängigkeit von den willkürlichen Verhältnissen η_p und η_s nur dann als Eigenschaft des Systems anzusehen, wenn man stillschweigend nur experimentliche Situationen mit ein und für alle mal festgewählten η_p und η_s vor Augen hat: üblicher Weise $\eta_p = \eta_s = 0$ (einseitige Einstrahlung von unten), oder aber $\eta_p = \eta_s = \pm 1$ (Anwendung von bez. Mittelebene $x_3 = a/2$ geraden bzw. ungeraden Feldern $\mathcal{E}^{ext}_{p/s}(q_1 q_2 x_3(\omega))$).

$\eta_p = \eta_s = 0$ (analog $\eta_p^{-1} = \eta_s^{-1} = 0$):

$$\begin{bmatrix} Z^{pp}_{(1)} & Z^{ps}_{(1)} \\ Z^{sp}_{(1)} & Z^{ss}_{(1)} \end{bmatrix} = \frac{1}{(1-Q^{pp}_{(1)})(1-Q^{ss}_{(1)}) - Q^{ps}_{(1)}Q^{sp}_{(1)}} \begin{bmatrix} 1+Q^{pp}_{(1)} & Q^{ps}_{(1)} \\ Q^{sp}_{(1)} & 1+Q^{ss}_{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c\lambda/z\,(1-Q^{ss}_{(1)}) & z/c\lambda\, Q^{ps}_{(1)} \\ c\lambda/z\, Q^{sp}_{(1)} & z/c\lambda\,(1-Q^{pp}_{(1)}) \end{bmatrix} \tag{11.11}$$

$$\begin{bmatrix} Z^{pp}_{(2)} & Z^{ps}_{(2)} \\ Z^{sp}_{(2)} & Z^{ss}_{(2)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} c\lambda/z & 0 \\ 0 & z/c\lambda \end{bmatrix} \tag{11.12}$$

$\eta_p = \eta_s = \pm 1$: $(i,j = 1,2 \wedge i \neq j)$

$$\begin{bmatrix} Z^{pp}_{(i)glu} & Z^{ps}_{(i)glu} \\ Z^{sp}_{(i)glu} & Z^{ss}_{(i)glu} \end{bmatrix} = \frac{1}{(1-Q^{pp}_{(i)} \mp T^{pp}_{(j)})(1-Q^{ss}_{(i)} \mp T^{ss}_{(j)}) - (Q^{ps}_{(i)} \pm T^{ps}_{(j)})(Q^{sp}_{(i)} \pm T^{sp}_{(j)})} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} 1+Q^{pp}_{(i)} \pm T^{pp}_{(j)} & Q^{ps}_{(i)} \pm T^{ps}_{(j)} \\ Q^{sp}_{(i)} \pm T^{sp}_{(j)} & 1+Q^{ss}_{(i)} \pm T^{ss}_{(j)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c\lambda/z\,(1-Q^{ss}_{(i)} \mp T^{ss}_{(j)}) & z/c\lambda\,(Q^{ps}_{(i)} \pm T^{ps}_{(j)}) \\ c\lambda/z\,(Q^{sp}_{(i)} \pm T^{sp}_{(j)}) & z/c\lambda\,(1-Q^{ss}_{(i)} \mp T^{ss}_{(j)}) \end{bmatrix} \tag{11.13}$$

Offensichtlich ist diese Wahl angebracht, wenn die Schicht bei $x_3 = a/2$ eine Spiegelebene besitzt (cf. weiter unten). Denn dann gilt die Matrizengleichung $Z^{glu}_{(1)} = Z^{glu}_{(2)}$.

12. Der Energiefluß in die Schicht (Definitheits-Aussagen)

Gemäß Gl. (5.2a) und Gl. (5.4a) gilt für den Energie-Strom in x_3-Richtung bei $x_3 \to -\infty$

$$S^{(1)} = \tfrac{1}{L^2} \sum_{q_1 q_2} \tfrac{1}{2\pi} \int d\omega\, c \left\{ \mathcal{E}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_s^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) - \mathcal{E}_s^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega)^* \mathcal{B}_\rho^{(1)}(q_1 q_2 x_3 \omega) \right\}.$$

Spezielle Wahl von $x_3 = 0$ führt auf

$$S^{(1)} = \tfrac{1}{L^2} \sum_{q_1 q_2} \tfrac{1}{2\pi} \int d\omega\, c \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 0\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 0\omega)'' \end{bmatrix}^{*t} \begin{bmatrix} Z_{(1)}^{\rho\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(1)}^{\rho s}(q_1 q_2 \omega) \\ Z_{(1)}^{s\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(1)}^{ss}(q_1 q_2 \omega) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 0\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 0\omega)'' \end{bmatrix}. \qquad (12.1)$$

Analog folgt für den Energiefluß nach $x_3 \to +\infty$

$$S^{(2)} = -\tfrac{1}{L^2} \sum_{q_1 q_2} \tfrac{1}{2\pi} \int d\omega\, c \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 a\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 a\omega)'' \end{bmatrix}^{*t} \begin{bmatrix} Z_{(2)}^{\rho\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{\rho s}(q_1 q_2 \omega) \\ Z_{(2)}^{s\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{ss}(q_1 q_2 \omega) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 a\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 a\omega)'' \end{bmatrix} \qquad (12.2)$$

Die einzelnen Fourier-Komponenten der Felder sind voneinander unabhängig - bis auf die Forderung $\mathcal{E}^{\rho/s}(q_1 q_2 x_3 \omega) = -\mathcal{E}^{\rho/s}(-q_1 - q_2 x_3 - \omega)^*$. Daher folgt aus

$$\Delta E := S^{(1)} - S^{(2)} > 0,$$

daß spezieller $\left(\Delta E = \tfrac{1}{L^2} \sum_{q_1 q_2} \tfrac{1}{2\pi} \int d\omega\, \Delta E(q_1 q_2 \omega)\right)$

$$\Delta E(q_1 q_2 \omega) := \tfrac{1}{2}\left(S^{(1)}(q_1 q_2 \omega) + S^{(2)}(-q_1 - q_2 - \omega)\right) - \tfrac{1}{2}\left(S^{(1)}(q_1 q_2 \omega) + S^{(2)}(-q_1 - q_2 - \omega)\right)$$

$$= \frac{c}{2} \left\{ \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 0\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 0\omega)'' \end{bmatrix}^{*t} \left(\begin{bmatrix} Z_{(1)}^{\rho\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(1)}^{\rho s}(q_1 q_2 \omega) \\ Z_{(1)}^{s\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(1)}^{ss}(q_1 q_2 \omega) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Z_{(2)}^{\rho\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{\rho s}(q_1 q_2 \omega) \\ Z_{(2)}^{s\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{ss}(q_1 q_2 \omega) \end{bmatrix}^+ \right) \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 0\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 0\omega)'' \end{bmatrix} \right.$$

$$\left. + \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 a\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 a\omega)'' \end{bmatrix}^{*t} \left(\begin{bmatrix} Z_{(2)}^{\rho\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{\rho s}(q_1 q_2 \omega) \\ Z_{(2)}^{s\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{ss}(q_1 q_2 \omega) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Z_{(2)}^{\rho\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{\rho s}(q_1 q_2 \omega) \\ Z_{(2)}^{s\rho}(q_1 q_2 \omega) & Z_{(2)}^{ss}(q_1 q_2 \omega) \end{bmatrix}^+ \right) \begin{bmatrix} \mathcal{E}_\rho(q_1 q_2 a\omega)'' \\ \mathcal{E}_s(q_1 q_2 a\omega)'' \end{bmatrix} \right\}$$

$$> 0 \qquad (12.3)$$

gilt. Damit erweist sich auch, daß der vorgelegte Begriff der Oberflächen-Impedanz die Eigenschaft (*ii*) besitzt. Wie oben angekündigt (p.36) ist damit für $\Delta E(q_1 q_2 \omega)$ eine Form angegeben, deren Matrix $\mathcal{Z}$ in die komplexe Frequenz-Ebene holomorph fortsetzbar ist.

Je nach Wahl der η_ρ, η_s erhält man verschiedene vereinfachte Ausdrücke für ΔE:

$\eta_\rho = \eta_s = 0$:

$$\Delta E = c \left\{ \begin{bmatrix} {}''\mathcal{E}_\rho(0)''^* \\ {}''\mathcal{E}_s(0)''^* \end{bmatrix}^t \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} Z^{\rho\rho}_{(\omega)} & Z^{\rho s}_{(\omega)} \\ Z^{s\rho}_{(\omega)} & Z^{ss}_{(\omega)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Z^{\rho\rho}_{(\omega)} & Z^{\rho s}_{(\omega)} \\ Z^{s\rho}_{(\omega)} & Z^{ss}_{(\omega)} \end{bmatrix}^+ \right) \begin{bmatrix} {}''\mathcal{E}_\rho(0)'' \\ {}''\mathcal{E}_s(0)'' \end{bmatrix} \right\} - \frac{\omega}{c\lambda} |{}''\mathcal{E}_\rho(0)''|^2 - \frac{\omega}{c\lambda} |{}''\mathcal{E}_s(0)''|^2 \Big\}$$

Es folgt, daß die Form mit dem hermiteschen Teil der Matrix $\mathcal{Z}_{(\omega)}$ für sich positiv-definit ist. Dabei ist die Matrix $\mathcal{Z}_{(\omega)}$ wie in Gl. (11.11) angeschrieben. Üblicher Weise wird jetzt geschlossen, daß der hermitesche Teil von $\mathcal{Z}_{(\omega)}$ positiv definit, also seine Haupt-Unterdeterminanten positiv sind. Streng genommen ist dieser Schluß zweifelhaft. Denn $''\mathcal{E}_\rho(0)''$ und $''\mathcal{E}_s(0)''$ sind totale Felder, nicht frei wählbare externe? Trotzdem wird - abgesehen vielleicht von pathologischen Fällen - die Mannigfaltigkeit der physikalisch möglichen ($''\mathcal{E}_\rho(0)''$, $''\mathcal{E}_s(0)''$) zweidimensional sein, so daß der Schluß wieder gilt.

$\eta_\rho = \eta_s = \pm 1$:

Die Schicht habe bei $x_3 = a/2$ eine Spiegelebene. Dann sind aber bei dieser Wahl der η_ρ, η_s nicht nur die angewandten Felder gerade/ungerade bez. dieser Ebene, auch die anderen sind g/u - Felder. Speziell folgt für $''\mathcal{E}^{g/u}(0)'' := \frac{1}{2}({}''\mathcal{E}(0)'' \pm {}''\mathcal{E}(a)'')$

$$''\mathcal{E}^{g/u}(0)'' = ''\mathcal{E}(0)'' = \pm ''\mathcal{E}(a)'' = \pm\, ''\mathcal{E}^{g/u}(a)''$$

Es folgt

$$\Delta E = c \cdot 2 \left\{ \begin{bmatrix} {}''\mathcal{E}^{g/u}_\rho(0)''^* \\ {}''\mathcal{E}^{g/u}_s(0)''^* \end{bmatrix}^t \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} Z^{\rho\rho}_{g/u} & Z^{\rho s}_{g/u} \\ Z^{s\rho}_{g/u} & Z^{ss}_{g/u} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Z^{\rho\rho}_{g/u} & Z^{\rho s}_{g/u} \\ Z^{s\rho}_{g/u} & Z^{ss}_{g/u} \end{bmatrix}^+ \right) \begin{bmatrix} {}''\mathcal{E}^{g/u}_\rho(0)'' \\ {}''\mathcal{E}^{g/u}_s(0)'' \end{bmatrix} \right\}$$

mit der Matrix $\mathcal{Z}_{g/u}$ wie in Gl. (11.13) angeschrieben. Ihr hermitescher Teil sollte wieder positiv definit sein.

13. Das analytische Verhalten der Oberflächen-Impedanz

Gemäß Gl. (11.8f) ist das analytische Verhalten der Oberflächen-Impedanzen*) identisch mit denjenigen der RTK bis auf etwaige zusätzliche Pole an Stellen, wo die Nenner

$$(1-Q^{pp}_{(1)}-T^{pp}_{(1)}\eta_p)(1-Q^{ss}_{(2)}-T^{ss}_{(2)}\eta_s)-(Q^{ps}_{(1)}+T^{ps}_{(2)}\eta_s)(Q^{sp}_{(1)}+T^{sp}_{(2)}\eta_p) \qquad (13.1a)$$

bzw.

$$(1-Q^{pp}_{(2)}-T^{pp}_{(1)}\eta_p)(1-Q^{ss}_{(2)}-T^{ss}_{(1)}\eta_s)-(Q^{ps}_{(2)}+T^{ps}_{(1)}\eta_s)(Q^{sp}_{(2)}+T^{sp}_{(1)}\eta_p) \qquad (13.1b)$$

verschwinden. Es gibt also wieder einen "physikalischen Zweig" auf der längs der reellen Achse aufgeschnittenen z-Ebene - dort haben die Oberflächen-Impedanzen höchstens Pole - und durch analytische Fortsetzung über die reelle Achse hinaus entstehende "unphysikalische Zweige". Tatsächlich vermittelt ein Blick auf Gl. (11.4) das Gefühl, daß aus physikalischen Gründen jene fraglichen Nenner auf dem physikalischen Blatt nicht verschwinden können**), so daß die Oberflächen-Impedanzen ebenso wie die RTK auf dem physikalischen Blatt holomorph wären. Doch scheint ein Beweis dafür selbst für spezielle einfache Wahl von η_p, η_s nicht zu existieren.

Einige Autoren[8,10] führen Kausalitätsargumente an, indem sie Gl. (11.4) als Ausdruck für den linearen Respons des Feldes "$\underline{\mathcal{E}}(0)$" auf das Feld "$\underline{\mathcal{B}}(0)$" auffassen. Da dieser immer kausal sei, folge die Holomorphie der Oberflächen-Impedanzen in der oberen

---

*) Holomorphie der $\eta_p(z), \eta_s(z)$ vorausgesetzt; speziell für die (faktisch ausschließlich betrachteten) reellkonstanten η_p, η_s ist sie trivial.

**) Nach p. 42 Fußnote erscheint das in der Tat für reelle Frequenzen gewährleistet.

z-Halbebene. Dieser Schluß ist jedoch unzulässig, da das totale Feld "$\mathcal{E}(0)$" nicht frei wählbar ist. P.C. Martin hat einen solchen Fehlschluß bei dem "Beweis" der Holomorphie der longitudinalen D.K. $\varepsilon_L(q\,z)$ in der oberen z-Halbebene kritisiert.[9] Trotzdem scheinen die experimentlich gefundenen D.K. die Kramers-Kronig-Relationen zu erfüllen, also holomorph in der oberen Halbebene zu sein. Ähnlich hat Brändli bei Experimenten mit normal- und supraleitendem Blei[10] (und Blei-Legierungen) Hinweise gefunden, daß die Oberflächen-Impedanzen Kramers-Kronig-Relationen gehorchen.*)

Daher soll weiterhin angenommen werden, daß die Oberflächen-Impedanzen auf dem physikalischen Blatt auch keine Pole durch Nullstellen der Gl. (13.1) besitzen.

Bezüglich des Verhaltens der Oberflächen-Impedanzen bei hohen Frequenzen hat man zunächst zu bedenken, daß für große z die Umklapp-Komponenten der RTK den direkten vergleichbar werden. Die Betrachtung allein der "ersten Ordnung" (Abschnitt 8) reicht nicht mehr aus. Das betrifft jedoch nicht die Definition der Oberflächen-Impedanz, die konsistent bleibt, "nur" ihren physikalischen Inhalt.

Das Verhalten der Oberflächen-Impedanzen für $z \to \infty$ ist bestimmt durch dasjenige der RTK (Abschn. 6). Gemäß den früheren Annahmen über das asymptotische Verhalten der RTK folgt nun:

$$\mathcal{Z}_{(i)}(q_1 q_2 z) \to \mathcal{Z}^{\circ}_{(i)}(q_1 q_2 z) \qquad (z \to \infty) \tag{13.2}$$

---

*) Tatsächlich erscheint die Oberflächen-Impedanz als ebenso

Dabei sind $\mathcal{Z}^{\circ}_{(\omega)}(q_1 q_2 z)$ die Oberflächen-Impedanzen einer "Vakuum-Schicht" der Dicke a:

$$\mathcal{Z}^{\circ}_{(\omega)}(q_1 q_2 z) := \begin{bmatrix} c\lambda/z\,(1+e^{i\lambda a}\eta_p)/(1-e^{i\lambda a}\eta_p) & 0 \\ 0 & z/c\lambda\,(1+e^{i\lambda a}\eta_s)/(1-e^{i\lambda a}\eta_s) \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{Z}^{\circ}_{(\omega)}(q_1 q_2 z) := \begin{bmatrix} c\lambda/z\,(1+e^{i\lambda a}\eta_p^{-1})/(1-e^{i\lambda a}\eta_p^{-1}) & 0 \\ 0 & z/c\lambda\,(1+e^{i\lambda a}\eta_s^{-1})/(1-e^{i\lambda a}\eta_s^{-1}) \end{bmatrix} \quad (13.3a\text{-}b)$$

Mit völlig denselben Argumenten wie oben (Absch6) folgt wieder eine Spektraldarstellung für den physikalischen Zweig der Oberflächen-Impedanzen:

$$\mathcal{Z}_{(\omega)}(q_1 q_2 z) - \mathcal{Z}^{\circ}_{(\omega)}(q_1 q_2 z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi}\, \frac{\mathcal{A}_{(\omega)}(q_1 q_2 \omega)}{\omega - z} \quad (13.4)$$

mit den anti-hermiteschen Spektraldichten:

$$\mathcal{A}_{(\omega)}(q_1 q_2 \omega) := \lim_{\varepsilon \to 0} \tfrac{1}{2i}\left\{\left(\mathcal{Z}_{(\omega)}(q_1 q_2 \omega + i\varepsilon) - \mathcal{Z}^{\circ}_{(\omega)}(q_1 q_2 \omega + i\varepsilon)\right) - \left(\mathcal{Z}_{(\omega)}(q_1 q_2 \omega - i\varepsilon) - \mathcal{Z}^{\circ}_{(\omega)}(q_1 q_2 \omega - i\varepsilon)\right)\right\} \quad (13.5)$$

Wieder folgen Kramers-Kronig-Relationen, die die hermiteschen und anti-hermiteschen bzw. die reellen und imaginären Teile miteinander verknüpfen (Abschnitt6).

Nach p. 46 ist in vielen Fällen*) der hermitesche Teil von $\mathcal{Z}_{(\omega)}(\omega)$ positiv-definit. Dann läßt sich mit Hilfe der Spektraldarstellung zeigen, daß der hermitesche Teil $\mathcal{Z}^{+}_{(\omega)}(z)$ von $\mathcal{Z}_{(\omega)}(z)$ auf dem ganzen physikalischen Blatt definit ist und zwar positiv in der oberen und negativ in der unteren Halbebene. Denn $(z = z_1 + i z_2)$:

"invers" zu den (holomorphen) RTK wie die D.K. $\varepsilon_L(qz)$ zu der (holomorphen) Funktion $\varepsilon_L(qz)^{-1} = 1 - 1/q^2\, \chi_{ss}(qz)$.

*) Der wichtigste Fall: $\mathcal{Z}_{(\omega)}$ für $\eta_p = \eta_s = 0$.

$$\mathcal{Z}'_{(i)}(z) = \frac{1}{2}\left(\mathcal{Z}_{(i)}(z) + \mathcal{Z}_{(i)}(z^*)^+\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\mathcal{Z}^0_{(i)}(z) + \mathcal{Z}^0_{(-i\omega)}(z)^+\right) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mu_{(i)}(\omega) \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega - z} - \frac{1}{\omega - z^*}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\mathcal{Z}^0_{(i)}(z) + \mathcal{Z}^0_{(i)}(z)^+\right) + z_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\mathcal{Z}'_{(i)}(\omega) - \frac{1}{2}\left(\mathcal{Z}^0_{(i)}(\omega) + \mathcal{Z}^0_{(-i\omega)}(\omega)^+\right)}{|\omega - z|^2}$$

$$\Rightarrow \mathcal{Z}'_{(i)}(z) = z_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\mathcal{Z}'_{(i)}(\omega)}{|\omega - z|^2} \quad *) \qquad (13.6)$$

Daher folgt aus der positiven Definitheit von $\mathcal{Z}'_{(i)}(\omega)$ die (sign z_2)-Definitheit von $\mathcal{Z}'_{(i)}(z)$. Dann folgt aber auch, daß $\mathcal{Z}_{(i)}(z)$ auf dem ganzen physikalischen Blatt invertierbar ist.

14. Symmetrie-Aussagen**)

Aus den Symmetrie-Aussagen über die Reflexions- und Transmissions-Koeffizienten ergeben sich solche über die Oberflächen-Impedanz:

1. Spiegelung an der imaginären Frequenz-Achse

$$\mathcal{Z}_{(i)}(q_1 q_2 - z^*) = \mathcal{Z}_{(i)}(-q_1 - q_2 z)^* \qquad (14.1)$$

2. Spiegelung an der reellen Frequenz-Achse

$$\mathcal{Z}_{(i)}(q_1 q_2 z^*) = -\mathcal{Z}_{(i)}(q_1 q_2 z)^+ \qquad (14.2)$$

---

*) Man könnte sich vorstellen, daß diese Gl. noch gültig ist, wenn die obigen Annahmen über das asymptotische Verhalten der RTK und die von ihnen abhängige Spektraldarstellung nicht mehr zutreffen.

**) cf.p. 28 (Fußnote)

3. Zeitumkehr-Invarianz führt nicht allgemein auf die gewünschte Relation

$$Z_{(i)}(q_1 q_2 z; B) = Z_{(i)}(-q_1 - q_2 z; -B)^t \qquad (14.3)$$

wohl aber in vielen Fällen z.B. (i) bei einseitiger Einstrahlung $\eta_p = \eta_s = 0$ bzw. $\eta_p^{-1} = \eta_s^{-1} = 0$

(ii) bei Existenz einer Spiegelebene $x_3 = a/2$, so daß $Q^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z) = Q^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 \bar{z})$ etc.

Es folgt dann weiter für B = 0:

$$Z_{(i)}(q_1 q_2 - z) = -Z_{(i)}(q_1 q_2 z) \qquad (14.3')$$

4. Aus der Symmetrie des Systems um die $x_3 = a/2$-Ebene folgt

$$Z_{(i)}(B_1 B_3) = Z_{(i)}(-B_1 B_3) \qquad (14.4)$$

nur dann, wenn $\eta_p = \pm 1$ und $\eta_s = \pm 1$, wenn also auch die experimentliche Anordnung symmetrisch/antisymmetrisch zu $x_3 = a/2$ ist.

5. Sofern die Verhältnisse $\eta_p(q_1 q_2 z), \eta_s(q_1 q_2 z)$ Skalare der "ebenen" Punktgruppe der Schicht sind, wenn also die Symmetrie der experimentlichen Anordnung (i.e. die Einstrahlung externer Felder) nicht geringer ist als die des Systems, ist gesichert, daß auch die zwei mal vier Komponenten der Oberflächen-Impedanz

$$Z^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ Z^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z; B);\ Z^{ps}_{(i)}(q_1 q_2 z; B),\ Z^{sp}_{(i)}(q_1 q_2 z; B)$$

Skalare bzw. Pseudo-Skalare der Punktgruppe sind.

Liegt der (ebene) Argumentvektor q_i auf einer Spiegelgeraden, so sind die Skalare gerade, die Pseudo-Skalare ungerade Funktionen der Projektion des Magnetfeldes B auf jene die x_3-Achse enthaltende Spiegelebene der Schicht, deren Spur in der x_1, x_2-Ebene, jene Spiegelgerade definiert. Verschwindet diese Projektion, so

auch die pseudo-skalaren Größen. In diesem Fall sind, wie schon erwähnt, TM-Felder und TE-Felder entkoppelt.

Will man sich nicht auf ein bestimmtes (ebenes) Koordinaten-System beziehen, so kann man schreiben

$$\text{"}\mathcal{E}_i(0)\text{"} = \mathcal{Z}^{ij}_{(a)}\ \text{"}\mathcal{B}_j(0)\text{"} \quad \wedge \quad \text{"}\mathcal{E}_i(a)\text{"} = -\mathcal{Z}^{ij}_{(a)}\ \text{"}\mathcal{B}_j(a)\text{"} \tag{14.5}$$

mit den beiden Pseudo-2-Tensoren

$$\mathcal{Z}^{ij}_{(i)} := q_i q_j^s/q_u^2\ \mathcal{Z}^{kp}_{(i)} - q_i q_j/q_u^2\ \mathcal{Z}^{ps}_{(i)} + q_i^s q_j^s/q_u^2\ \mathcal{Z}^{sp}_{(i)} - q_i^s q_j/q_u^2\ \mathcal{Z}^{ss}_{(i)} \ . \tag{14.6}$$

15. Übergang zur Punktgruppe der kontinuierlichen Schicht

Aus praktischen Gründen wird es meistens ratsam sein, als ebene Punktgruppe der Schicht (vor Einschalten eines symmetriebrechenden Magnetfeldes B!) nicht eine der zehn Punktgruppen des ebenen Kristalls sondern die des Kontinuums anzusehen, nämlich die kontinuierliche Gruppe der zweidimensionalen Drehungen mit Spiegelgerade. Man schließt sofort, daß alle skalaren und pseudo-skalaren Größen Funktionen nur von

$$q_u^2 = q_i q_i\ ,\ \mathcal{B}_u^2 = \mathcal{B}_i \mathcal{B}_i\ ,\ \mathcal{B}_p = q_i/q_u\ \mathcal{B}_i\ ,\ \mathcal{B}_s = q_i^s/q_u\ \mathcal{B}_i\ ,\ \mathcal{B}_3 \qquad \text{und} \qquad q_3, q_3'$$

sein können.

Da jetzt q_i immer auf einer Spiegelgeraden liegt, sind die Skalare immer gerade und die Pseudo-Skalare ungerade Funktionen von (B_p, B_3); Verschwinden B_p und B_3, so auch alle pseudo-skalaren Größen.

Besonders wenn kein Magnetfeld B die Symmetrie der Schicht bricht, vereinfachen sich alle angeschriebenen Symmetrie-Relationen stark.

IV.
16. Die RTK und Volumen-Moden, Definition der Schichtanregungen

Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten (RTK)

$$\mathcal{R}^{pp}_{(\omega)}(q;z;\beta),\ \mathcal{R}^{ss}_{(\omega)}(q;z;\beta) \qquad \text{etc.}$$

sind so eingeführt worden, daß in ihnen die elektromagnetische Wirkung der betrachteten Schicht auf die beiden (asymptotischen) Außenräume - so weit die lineare Näherung ausreicht - vollständig enthalten ist.

Daher sind sie, ihre Ableitungen oder Kombinationen aus ihnen oder wenigstens gewisse Resonanzen u.ä. die Meßgrößen bei fast allen Untersuchungen mit elektromagnetischen Feldern*):

a) bei der Bestimmung des Spektrums jener lichtwellenartigen Anregungen des homogenen Mediums, für die der Name "bulk-Polaritonen" üblich geworden ist. In sog. one-sided transmission oder two-sided reflection experiments[1] zeigen sich die Polaritonen in Durchlässigkeitsbanden, Oszillationen in der Energie-Aufnahme oder der Phase. Die Position der Resonanzen wird durch die Dispersionsrelationen des homogenen Mediums noch erfolgreich angegeben; für die Voraussage der Phasen, Linienform und relativen Intensitäten ist die Kenntnis der RTK erforderlich.

---

*) mit Ausnahme der Streu-Experimente mit Laser-Licht, die aber als nicht-lineare Prozesse außerhalb des Gesichtskreises hier bleiben, z.B.[11]

b) bei der Bestimmung der Spektrums von Ein-Teilchen-Anregungen (die Zyklotron-Resonanz nach Azbel u. Kaner,[12] die "skipping electrons" nach Prange u. Nee,[13] die Gantmacher-Kaner-Oszillationen,[14] die Leitungselektronen-Spin-Resonanz[15]). Die gemessenen Oszillationen der Energie-Aufnahme in der Frequenz- oder der Magnetfeld-Abhängigkeit stehen wegen Gl. (9.2f) oder Gl. (12.3) in Zusammenhang mit Oszillationen der RTK oder der Oberflächen-Impedanzen.

c) bei der Bestimmung des Spektrums wellenartiger (elektromagnetischer) Anregungen dünner Schichten: Oberflächen-Polaritonen u.ä. Dieser Punkt soll im folgenden betrachtet werden.

Die zuletzt erwähnten wellenartigen Anregungen der Schicht ("Schicht-Polaritonen") müssen als spontane, makroskopische elektromagnetische Felder vorgestellt werden, die (wenigstens mit exponentiellen Schwänzen) in die Außenräume hineinreichen. Sie sind folglich bestimmt durch die Pole der RTK*). Solche Pole $z_s = z_s(q_i B)$ können, wie schon oben erörtert, nicht auf dem physikalischen Blatt liegen. Von physikalischem Interesse sind nur solche Pole z_s, die auf jenen Blättern, die durch Fortsetzung aus der oberen z-Halbebene des physikalischen Blattes entstehen, dicht unterhalb der reellen Achse liegen:

$$z_s = \omega_s - \tfrac{i}{2}\gamma' \qquad |\omega_s| \gg \gamma' > 0$$

---

*) Von diesen (spontanen Anregungen sind jene "Oberflächenwellen" (Zenneck-Wellen, Brewster-Moden) zu unterscheiden, die mit einer Nullstelle z_B eines Reflexionskoeffizienten

Da gemäß Gl. (95a-b) für $\omega^2 > c^2 q_\parallel^2$ die Abschätzungen

$$|\mathcal{Q}^{pp}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{pp}_{(\omega)}|^2 + |\omega/\lambda\, \mathcal{Q}^{ss}_{(\omega)}|^2 + |\omega/\lambda\, \mathcal{T}^{sp}_{(\omega)}|^2 \leq 1$$

$$|\mathcal{Q}^{ss}_{(\omega)}|^2 + |\mathcal{T}^{ss}_{(\omega)}|^2 + |\omega/\lambda\, \mathcal{Q}^{ps}_{(\omega)}|^2 + |\omega/\lambda\, \mathcal{T}^{ps}_{(\omega)}|^2 \leq 1$$

gelten, sind solche achsennahen Pole z_s nur in dem Bereich

$$-cq_\parallel < \omega_s < cq_\parallel$$

möglich. In den Bereichen $\omega^2 > c^2 q_\parallel^2$ läßt die Kopplung mit dem Strahlungsfeld in den Außenräumen höchstens Resonanzen, aber keine langlebigen Anregungen zu.

Daher werde definiert:*)

Polariton-Wellen der Schicht, d.h. ihre Frequenz und Dämpfung, sind als Funktionen des ebenen Wellenvektors q_i (und des statischen Magnetfeldes B) gegeben durch die (wie oben erörtert gelegenen) Pole der Reflexionskoeffizienten:

$$z_s = \omega_s(q_i B) - i/2\, \bar{\gamma}'(q_i\, \omega_s B).$$

---

verknüpft sind, die auf der Fortsetzung der oberen Halbebene des physikalischen Blattes dicht unterhalb der reellen Frequenzachse liegt: $z_B = \omega_B - i/2\, \bar{\gamma}'$, und zwar im Strahlungsbereich $\omega_B^2 > c^2 q_\parallel^2$. In diesem Fall hat die (unphysikalische!) einlaufende Welle das von der Oberfläche her abklingende Verhalten einer Oberflächen-Welle.

*) Die Feststellung, daß die Pole eines speziellen Ausdrucks für den Reflexionskoeffizienten einer dielektrischen Schicht die Lichtleiter-Moden (trapped modes) angeben, findet sich schon bei R.E. Collin (1960)[16], p. 487. In jüngerer Zeit hat erst wieder A.S. Barker Jr.[17] Oberflächen-Polaritonen als Pole einer Responsfunktion T beschrieben. Dabei ist T das Verhältnis der an der Grenzebene zweier

Genauer: Die in der Nähe solcher Pole gültige Näherung

$$R^{pp}_{(i)}(q_i z B) \approx \frac{R^{pp}_{(i)}(q_i \omega_s B)}{\gamma - \omega_s(q_i B) + i/2\, \bar{\gamma}'(q_i \omega_s B)} \qquad (16.1)$$

(oder ähnlich für die anderen Koeffizienten) bestimmt die Phänomenologie solcher Wellen: Frequenz, Dämpfung, Oszillatorstärke, Energie-Inhalt und thermische Fluktuationen.*)

Der Absolutwert der Transmissionskoeffizienten an der Stelle ω_s kann dabei als Maß für den Oberflächen- oder Volumen-Charakter der Anregung angesehen werden.

Ein solcher Pol $z_s = z_s(q_i)$ macht sich gemäß Gl. (9.2f) in der Energie-Aufnahme $\Delta E(q_i \omega)$ der Schicht aus der $(q_i \omega)$-Komponente angewandter Felder durch eine Spitze bei $\omega \approx \omega_s$ mit der Halbwertsbreite $\bar{\gamma}'$ bemerkbar.

---

durch ihre D.K. ε_i bzw. ε_a beschriebenen Medien induzierten Oberflächenladung zu der sie induzierenden Testladung. Auch die Oberflächenpolariton-Responsfunktionen, die G.S. Agarwal[18] konzipiert, bleiben im Rahmen dieser Näherung.

*) Speziell für das Modell eines durch seine lokale D.K. $\varepsilon(z)$ beschriebenen Halbraums (cf. nachfolgendes Kapitel) reproduziert man mit Hilfe einer solchen Pol-Approximation für den Fresnelschen Koeffizienten $R^{pp}_o(q_\parallel z)$ (17.2) in Verbindung mit Gl. (9.2f) leicht die Ergebnisse von J. Nkoma et al.[19] bzw. für $\varepsilon(z) = 1 - \omega_p^2/z(z+i\Gamma)$ die von J.M. Elson und R.H. Ritchie.[20]

Man könnte im Zweifel sein, ob man nicht zweierlei solcher Wellen-Anregungen der Schicht zu unterscheiden habe: Pole der Reflexions- und Pole der Transmissionskoeffizienten. Tatsächlich sollten wegen ihrer engen Verbindung mit einander beide dieselben Pole haben; explizite Modell-Rechnungen bestätigen dieses Gefühl (cf. Abschnitt 33).

17. Ein Beispiel: 1. Das analytische Verhalten

Um ein konkretes, einfaches Beispiel vor Augen zu haben, betrachte man eine durch die lokale D.K. ihres Mediums beschriebene Schicht. Die RTK eines solchen Systems werden sich weiter unten ergeben zu:[21]

$$\mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_\parallel z) = -\frac{\mathcal{R}^{pp}_o(q_\parallel z)\left(1-(e^{i\lambda' a})^2\right)}{1-\left(\mathcal{R}^{pp}_o(q_\parallel z)\right)^2 (e^{i\lambda' a})^2} \qquad \mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_\parallel z) = \frac{1-\left(\mathcal{R}^{pp}_o(q_\parallel z)\right)^2}{1-\left(\mathcal{R}^{pp}_o(q_\parallel z)\right)^2 (e^{i\lambda' a})^2}\, e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{R}^{ss}_{(i)}(q_\parallel z) = \frac{\mathcal{R}^{ss}_o(q_\parallel z)\left(1-(e^{i\lambda' a})^2\right)}{1-\left(\mathcal{R}^{ss}_o(q_\parallel z)\right)^2 (e^{i\lambda' a})^2} \qquad \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_\parallel z) = \frac{1-\left(\mathcal{R}^{ss}_o(q_\parallel z)\right)^2}{1-\left(\mathcal{R}^{ss}_o(q_\parallel z)\right)^2 (e^{i\lambda' a})^2}\, e^{i\lambda' a} \qquad (17.1)$$

Die übrigen RTK verschwinden.

Die $\mathcal{R}^{pp}_o(q_\parallel z)$ und $\mathcal{R}^{ss}_o(q_\parallel z)$ sind die jeweiligen Halbraum-Limites ($a \to \infty$), d.h. die Fresnelschen Formeln:

$$\mathcal{R}^{pp}_o(q_\parallel z) = \frac{\lambda' - \varepsilon(z)\lambda}{\lambda' + \varepsilon(z)\lambda} \qquad \mathcal{R}^{ss}_o(q_\parallel z) = -\frac{\lambda' - \lambda}{\lambda' + \lambda} \qquad (17.2)$$

Mit λ' ist in Anlehnung an die x_3-Komponente $\pm\lambda$ des Wellenvektors in den Außenräumen die x_3-Komponente des Wellenvektors in der Schicht bezeichnet:

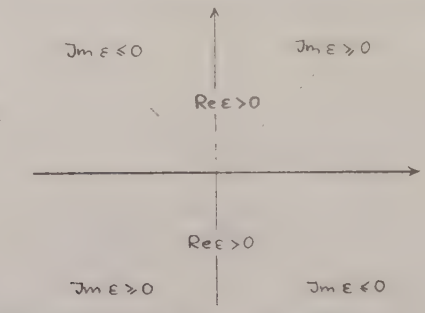
$$\lambda' := \sqrt{\varepsilon(z)z^2/c^2 - q_\parallel^2} \qquad (17.3)$$

Dabei ist wieder der Zweig der Wurzelfunktion mit nicht-negativem Imaginärteil gewählt*) und für $\varepsilon(z)^3$ der physikalische Zweig**):

$$\varepsilon(z) = 1 + \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\sigma'(\omega)}{\omega^2 - z^2} \qquad (\mathrm{Im}\, z \neq 0) \qquad (17.4)$$

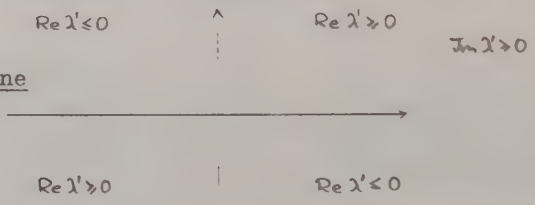
$$= \left\{ 1 + \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega^2 \sigma'(\omega)}{|\omega^2 - z^2|^2} - (z_1^2 - z_2^2) \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\sigma'(\omega)}{|\omega^2 - z^2|^2} \right\} + i \left\{ 2 z_1 z_2 \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\sigma'(\omega)}{|\omega^2 - z^2|^2} \right\}$$

Abb.4



Tatsächlich ist dann λ' auf dem physikalischen Blatt holomorph und seine "Signatur"

Abb.5

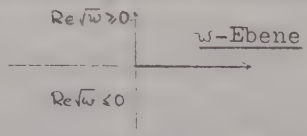


ist dieselbe wie die von λ ***).

---

*) $\sqrt{\omega}$ ist folgender Zweig der Wurzelfunktion:

Abb.6



**) P.C. Martin loc. cit. Die Spektraldichte ist positiv: $\sigma'(\omega) \geq 0$. In der Drudeschen Näherung hat man: $\sigma'(\omega) = \pi\, \omega_p^2 \cdot 1/\pi\, (\gamma/(\omega^2 + \gamma^2))$

***) Beweis: (i) sign Re λ' = sign Im λ'^2 = sign $\mathrm{Im}\{\varepsilon(z)^2 z^2 - q_\parallel^2\}$

Zunächst sei festgestellt, daß in jedem Polarisationsfall die jeweiligen RTK tatsächlich die gleichen Pole haben. Sie besitzen hier überhaupt gleiche Nenner.

Die Pole von $\mathcal{Q}^{pp}_{(i)}(q_\parallel z)$ sind gegeben durch die Wurzeln der Gl.

$$\varepsilon(z)(-i\lambda) = -\lambda' \operatorname{ctg} \lambda' a/2 \qquad \text{(g-Moden)} \qquad (17.5a)$$

und der Gl.

$$\varepsilon(z)(-i\lambda) = \lambda' \operatorname{tg} \lambda' a/2 \qquad \text{(u-Moden)} \qquad (17.5b)$$

und die Pole von $\mathcal{Q}^{ss}_{(i)}(q_\parallel z)$ durch die Wurzeln von

$$-i\lambda = \lambda' \operatorname{tg} \lambda' a/2 \qquad \text{(g-Moden)} \qquad (17.5c)$$

und von

$$-i\lambda = -\lambda' \operatorname{ctg} \lambda' a/2 \qquad \text{(u-Moden)} \qquad (17.5d)$$

Nun ist

$$\varepsilon(z)\frac{z^2}{c^2} - q_\parallel^2 = \left\{\varepsilon_1(z)\frac{z_1^2}{c^2} - \varepsilon_2(z)\frac{2 z_1 z_2}{c^2} - q_\parallel^2\right\} + i\left\{\varepsilon_1(z)\frac{2 z_1 z_2}{c^2} + \varepsilon_2(z)\frac{z_1^2 - z_2^2}{c^2}\right\}$$

$$= \left\{\varepsilon_1(z)\frac{z_1^2}{c^2} - \varepsilon_2(z)\frac{2 z_1 z_2}{c^2} - q_\parallel^2\right\} + i \cdot 2 z_1 z_2 \left\{1 + \int \frac{d\omega}{\omega} \frac{\omega^2 \sigma'(\omega)}{|\omega^2 - z^2|^2}\right\}$$

$$\Rightarrow \operatorname{sign} \operatorname{Re} \lambda' = \operatorname{sign} z_1 z_2$$

Man beachte auch, daß für solche z, für die $\varepsilon_1(z) \leq 0$ gilt, $\operatorname{Re} \lambda'^2 \leq 0$ ist.

(ii) Auf dem physikalischen Blatt könnten Singularitäten von λ' nur durch Nullstellen des Radikanden gegeben sein, also höchstens auf der imaginären Achse vorkommen. Dort ist aber der Radikand negativ und nimmt monoton ab.

Für die nicht unter diese Spektraldarstellung subsumierbare Näherung $\varepsilon(z) = n^2 > 0$ ist der Beweis aller Aussagen trivial.

Im vorliegenden Fall kann man die obige Aussage, daß die RTK auf ihrem physikalischen Blatt holomorph sind, explizit verifizieren. Es mag genügen zu zeigen, daß die Gl. (17.5c)

$$-i\,\lambda' a/2 = \lambda' a/2 \operatorname{tg} \lambda' a/2$$

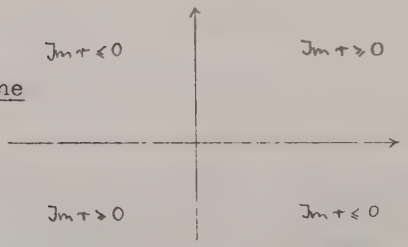
keine Lösung z auf dem physikalischen Blatt besitzt.

Dazu werde zunächst die Funktion $\tau = w \operatorname{tg} w$ betrachtet ($w = u + iv$):

$$\tau = w \operatorname{tg} w = (u+iv)\frac{\sin u \cdot \cosh v + i \cos u \cdot \sinh v}{\cos u \cdot \cosh v - i \sin u \cdot \sinh v}$$

$$= \frac{1}{2}\,\frac{(u \sin 2u - v \sinh v) + i(u \sinh 2v + v \sin 2u)}{(\cos u \cdot \cosh v)^2 + (\sin u \cdot \sinh v)^2}$$

Abb.7



Nun liegen die Bildpunkte $w = w(z) := \lambda' a/2$ für Frequenzen z aus dem physikalischen Blatt in der oberen w-Halbebene und zwar für z aus dem 1. und 3. Quadranten im 1. Quadranten der w-Ebene und für z aus dem 2. und 4. Quadranten im zweiten. Folglich nimmt die rechte Seite der fraglichen Gl., nämlich die Funktion $\tau = \tau(z)$, für z aus dem 1. und 3. Quadranten des physikalischen Blattes nicht-negative und für z aus dem 2. und 4. Quadranten nicht-positive Imaginärteile an. Dabei können letztere nur für rein imaginäre z verschwinden.

Dagegen nimmt die Funktion $-i\lambda a/2$ für z aus dem 1. und 3. Quadranten des physikalischen Blattes negative und für z aus dem 2. und 4. Quadranten positive Imaginärteile an. Daher kann die fragliche Gl. auf dem physikalischen Blatt keine Lösung besitzen.

2. Bestimmung der Anregungen der Schicht

Für den Grenzfall einer D.K., deren Imaginärteil für reelle Frequenzen ω verschwindet, rutschen die etwaigen achsennahen Pole auf die reelle Achse. Man kann folglich nach reellen Lösungen ω der Gln.

$$\varepsilon(\omega)(-i\lambda) = -\lambda' \operatorname{ctg} \lambda' a/2$$

P-Polarisation

$$\varepsilon(\omega)(-i\lambda) = \lambda' \operatorname{tg} \lambda' a/2 \qquad (17.6a\text{-}b)$$

bzw. der Gln.

$$-i\lambda = \lambda' \operatorname{tg} \lambda' a/2$$

S-Polarisation

$$-i\lambda = -\lambda' \operatorname{ctg} \lambda' a/2 \qquad (17.6c\text{-}d)$$

suchen. Zunächst stellt man fest, daß die rechten Seiten rein reell sind, gleichgültig ob λ' reell oder imaginär ist. Daher muß λ rein imaginär sein: $\lambda = i\lambda_2 (\lambda_2 > 0)$; d.h. $\omega^2 < c^2 q_\parallel^2$, wie schon oben diskutiert. Sodann erkennt man, daß für imaginäre λ', d.h. $\lambda' = i\lambda_2' (\lambda_2' > 0)$, wegen $\operatorname{tg} ix = i \operatorname{th} x$ und $\operatorname{ctg} ix = -i \operatorname{cth} x$ keine der beiden Gln. im S-Fall lösbar ist. Das selbe gilt für den P-Fall, solange nicht $\varepsilon(\omega) < 0$ wird.

Im letzteren Fall ist es nützlich, die beiden obigen Gln. in der Form

$$\varepsilon(\omega)\,\lambda_2 = -\lambda_2' \operatorname{ctg} \lambda' a/2$$
$$\varepsilon(\omega)\,\lambda_2 = -\lambda_2' \operatorname{tg} \lambda' a/2 \qquad (17.7a\text{-}b)$$

zu schreiben. Man erkennt in ihnen die Dispersionsrelation[22,23] der symmetrischen Mode (g-Mode) bzw. der antisymmetrischen Mode (u-Mode) des Oberflächen-Polaritons (Oberflächen-Plasmons) der Schicht. Tatsächlich haben diese Moden nach dem oben angegebenen Kriterium einen überwiegenden Oberflächen-Charakter: der Transmissionskoeffizient $T_{ii}^{pp}(q,z)$ wird an der Polstelle durch den Faktor $e^{-\lambda_2' a}$ herabgedrückt.

Lösungen der Gln. mit reellen $\lambda' = \lambda_1'$ würden dagegen auf Moden führen, bei denen der Volumen-Charakter überwiegt: der Faktor $e^{i\lambda_1' a}$ wird eine reine Phasengröße. Tatsächlich kann man solche "trapped modes" auffassen als eine ebene Lichtwelle in dem Medium der Schicht (Dielektrikum), die auf die Oberflächen unter überkritischem Winkel auftreffend total reflektiert wird und sich so auf einer Zickzack-Bahn in der Schicht ausbreitet. Wegen der Beziehung

$$\lambda'^2 - \lambda^2 = \lambda_1'^2 + \lambda_2^2 = (\varepsilon(\omega) - 1)\,\omega^2/c^2$$

sind solche "trapped modes" nur in einem Frequenzbereich möglich, in dem $\varepsilon(\omega) > 1$ gilt.

Um in diesem Bereich nach solchen Lichtleitermoden auf graphischem Wege zu suchen, schreibt man obige Gln. am besten in folgender Form:

$$\lambda_2 a/2 = -1/\varepsilon(\omega)\,(\lambda_1' a/2) \operatorname{ctg} (\lambda_1' a/2) \qquad \text{(g-Fall)}$$

P-Pol. (17.8a-b)

$$\lambda_2 a/2 = 1/\varepsilon(\omega)\,(\lambda_1' a/2) \operatorname{tg} (\lambda_1' a/2) \qquad \text{(u-Fall)}$$

bzw.

$$\lambda_2''/2 = (\lambda_1'''/2) \pm q(\lambda_1'''/2) \qquad \text{(g-Fall)}$$

S-Pol. (17.8c-d)

$$\lambda_2''/2 = -(\lambda_1'''/2)\, d_q(\lambda_1'''/2) \qquad \text{(u-Fall)}$$

Die Lösungen sind dann gegeben durch die Schnittpunkte im 1. Quadranten (für $\omega > 0$) bzw. im 2. Quadranten (für $\omega < 0$) der $(\lambda_1'''/2, \lambda_2''/2)$-Ebene der durch die obigen Gln. definierten (und zum Teil von dem Parameter ω abhängigen) Kurven mit dem durch die Beziehung

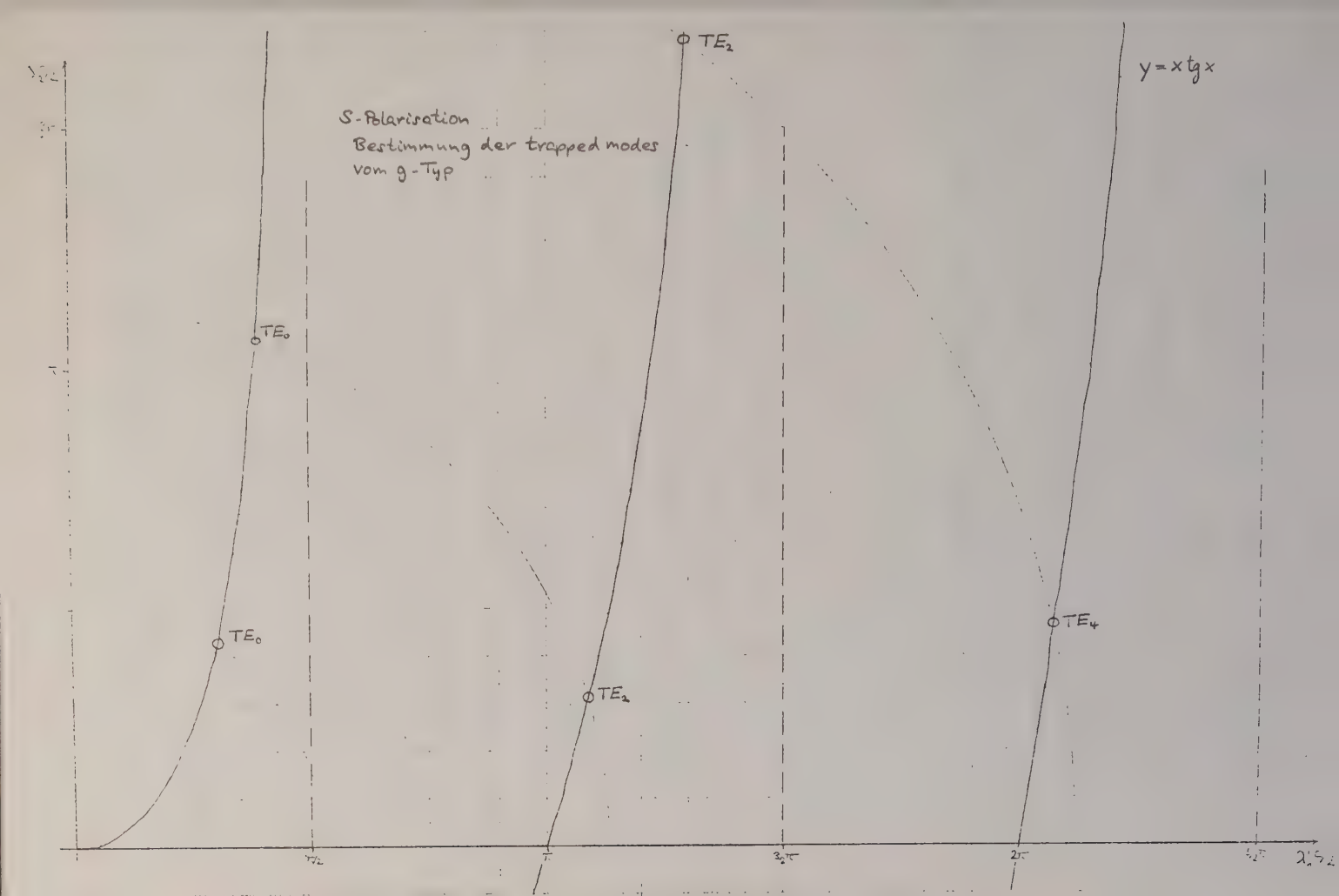
$$(\lambda_1'''/2)^2 + (\lambda_2''/2)^2 = (\varepsilon(\omega) - 1)(\omega/c \cdot 1/2)^2$$

definierten Kreis. Für den g-Fall der S-Polarisation ist das in der Skizze auf p. 64 exerziert.

Jedenfalls in diesem einfachen Beispiel enthält die S-Polarisation keine "echten" Oberflächen-Anregungen für die Schicht sondern nur die Lichtleiter-Moden.

18. Die Methode der geschwächten Totalreflexion (ATR)

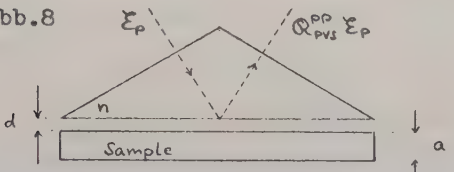
Die oben diskutierte definierende Beziehung zwischen den Polen der Reflexionskoeffizienten und den Oberflächen-Polariton-Wellen ist alles andere als nur theoretisch: Die heute meistgebrauchte Methode zur Feststellung von solchen Anregungen und Ausmessungen ihrer Dispersionsrelation, die die Methode der geschwächten Totalreflexion[24] (Attenuated Total Reflexion ATR) mißt gerade die Maxima des Reflexionskoeffizienten $R_{(\cdot)}^{\infty}(q,\omega)$ auf der reellen Frequenzachse.[25]


S-Polarisation
Bestimmung der trapped modes
vom g-Typ
$y = x \operatorname{tg} x$
TE_0
TE_0
TE_2
TE_2
TE_4
$\pi/2$
π
$3/2\pi$
2π
$5/2\pi$
λ/ε_2

Da dieser Punkt auch in der Literatur[17] noch nicht klargestellt worden zu sein scheint, soll das Prinzip dieser Methode kurz dargelegt werden:

> Licht fällt von einem durchsichtigen Medium mit dem (hohen) Brechungsindex n über eine planparallele Vakuumschicht*) der Dicke d auf das "Sample", eine Schicht der Dicke a. Ein Teil der Strahlung wird in das erste Medium reflektiert und gelangt zur Messung.

Abb.8



Aus dem Reflexionskoeffizienten $\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_{\parallel}z)$ des "Samples" und dem des (als halb-unendliches Medium behandelten) Prismas $\mathcal{R}^{pp}_{pv}$ bestimmt sich der gemessene Reflexionskoeffizient $\mathcal{R}^{pp}_{pvs}$ des Systems "Prisma-Vakuumschicht-Sample". Dabei sollen die praktisch konstanten Reflexionsverluste an den Schenkelflächen des Prismas außer Betracht bleiben. Wenn die Vakuumschicht dick genug ist, um für Prisma und Sample als "Außenraum" und "asymptotischer Bereich" im Sinne des Kapitels über die Definition der RTK angesehen werden zu können (tatsächlich entspricht ihre Dicke d $\gtrsim \lambda/\omega$ etwa einigen Wellenlängen), ergibt sich $\mathcal{R}^{pp}_{pvs}(q_{\parallel}z)$ aus $\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_{\parallel}z)$ und $\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_{\parallel}z)$ aufgrund der bekannten Überlegungen der Vielstrahl-Interferenz an planparallelen Platten.

---

*) oder ein Dielektrikum mit positiver (kleiner) D.K.
z.B. LiF

Man erhält (cf. Anhang):

$$\mathcal{R}^{pp}_{pvs}(q_\parallel,z) = \frac{-\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_\parallel,z) + \mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,z)(e^{i\lambda d})^2}{1-\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_\parallel,z)\,\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,z)(e^{i\lambda d})^2} \qquad (18.1)$$

Dabei ist für ein Prismenglas des Brechungsindex' n der Reflexionskoeffizient $\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q,z)$ durch den Fresnelschen Ausdruck

$$\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_\parallel,z) = \frac{\lambda' - n^2\lambda}{\lambda' + n^2\lambda} \qquad (\lambda' := \sqrt{n^2 z^2/c^2 - q_\parallel^2})$$

gegeben.

Der ATR-Bereich ist nun ein (reeller) Frequenzbereich, in dem $\omega^2 < c^2 q_\parallel^2$, also $\lambda = i\lambda_2 (\lambda_2 > 0)$, und $|\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_\parallel,\omega)|^2 = 1$ gilt; also etwa

$$(cq_\parallel/n)^2 < \omega^2 < (cq_\parallel)^2$$

In diesem Bereich folgt für das Normquadrat von $\mathcal{R}^{pp}_{pvs}(q_\parallel,\omega)$:

$$|\mathcal{R}^{pp}_{pvs}(q_\parallel,\omega)|^2 = \frac{1 - 2(e^{-\lambda_2 d})^2\, Re\{(\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q,\omega))^* \mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega)\} + |\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega)|^2 (e^{-\lambda_2 d})^4}{1 - 2(e^{-\lambda_2 d})^2\, Re\{\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_\parallel,\omega)\;\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega)\} + |\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega)|^2 (e^{-\lambda_2 d})^4} \qquad (18.2)$$

oder in linearer Näherung bez. des Faktors $(e^{-\lambda_2 d})^2 \ll 1$

$$|\mathcal{R}^{pp}_{pvs}(q_\parallel,\omega)|^2 = 1 - 4(e^{-\lambda_2 d})^2 (\mathrm{Im}\,\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_\parallel,\omega))(\mathrm{Im}\,\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega)).$$

Nach Gl. (9.3) sind $\mathrm{Im}\,\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q,\omega)$ und $\mathrm{Im}\,\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega)$ negativ, der Subtrahend also positiv, so daß $|\mathcal{R}^{pp}_{pvs}|^2 < 1$ gewährleistet ist. In der Nähe eines Oberflächen-Polariton-Poles $z_s = \omega_s(q_\parallel) - i/2\,\gamma'(q_\parallel\omega_s)$ ist die Frequenz-Abhängigkeit von $|\mathcal{R}^{pp}_{pvs}(q_\parallel,\omega)|^2$ wesentlich durch $\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega)$ bestimmt (Analoges gilt für die $q_\parallel$-Abhängigkeit), für das die Approximation

$$\mathcal{R}^{pp}_{(2)}(q_\parallel,\omega) \approx \frac{R(q_\parallel,\omega_s)}{\omega - \omega_s(q_\parallel) + i/2\,\gamma'(q_\parallel\omega_s)} \qquad (R(q_\parallel,\omega_s) > 0)$$

genommen werden soll. Es folgt, daß

$$|\mathcal{R}^{pp}_{pvs}(q_\parallel,\omega)|^2 = 1 - 4(e^{-\lambda_{s2} d})^2 \left(-\mathrm{Im}\,\mathcal{R}^{pp}_{pv}(q_\parallel,\omega_s)\right) \frac{1/2\,\gamma'(q_\parallel,\omega_s)\,R(q_\parallel,\omega_s)}{(\omega - \omega_s(q_\parallel))^2 + (1/2\,\gamma'(q_\parallel,\omega_s))^2} \qquad (18.3)$$

In der Nähe eines "guten" Oberflächen-Polariton-Poles sollte demnach der Intensitätsverlauf des reflektierten Lichts eine Lorentzsche Linienform haben.

Die vorstehende Überlegung hat außerdem gezeigt, daß eine scharfe Oberflächen-Polariton-Linie in der Intensitätskurve außer an die Bedingung schwacher Dämpfung, $\tilde{\gamma}^{-1}(q_\perp, \omega_s) \ll |\omega_s|$, auch an die Bedingung einer hinreichend dicken Vakuumschicht , $d \gg 1/\lambda_2$, geknüpft ist. Die Linien-Verbreiterung für $d \sim 1/\lambda_2$ hat Otto[24] als "Strahlungsdämpfung" beschrieben.

V. Dynamik des Elektronen-Strahlungsfeld-Systems

19. Der Hamilton-Operator des Systems

Die bisherigen Überlegungen betrafen sehr allgemeine Systeme. Es waren eher geometrische als dynamische Eigenschaften bei ihnen vorausgesetzt worden: Begrenzung und Symmetrien. In diesem Kapitel soll die Dynamik des betrachteten Systems spezifiziert werden.

Im weiteren soll ein System Coulombisch wechselwirkender Elektronen und Ionenrümpfe und eines mit diesen Teilchen wechselwirkenden transversalen (also Coulomb-Eichung!) quantisierten Strahlungsfeldes betrachtet. Wegen des großen Unterschieds zwischen Ionen- und Elektronenmasse soll die kinetische Energie und die Wechselwirkung der Ionen mit dem Strahlungsfeld vernachlässigt werden. Ihre Wechselwirkung mit den Elektronen wird erfaßt durch die potentielle Energie*)

$$\Phi_0(\underline{r}) = e \int d^3\bar{r}\, v(r - \bar{r}) \rho_{Ion}(\bar{r}) \qquad (19.1)$$

der Elektronen im Coulomb-Feld der starren Ionen. Für die Beschreibung der Dynamik der Elektronen genüge die nicht-relativistische Näherung. Es folgt der Hamilton-Operator[26]

$$H_0 = \sum_s \int d^3\tau \{ -\psi^+(\tau s)\hbar^2/2m \nabla^2 \psi(\tau s) + \phi_0(\tau)\psi^+(\tau s)\psi(\tau s)\}$$
$$+ \tfrac{1}{2}\sum_{ss'}\int d^3\tau d^3\tau' \psi^+(\tau s)\psi^+(\tau' s')\, e^2 v(\tau-\tau')\psi(\tau' s')\psi(\tau s)$$
$$- \sum_\mu \int d^3\tau \tfrac{1}{c} j_{n.d.}(\tau\mu) A(\tau\mu) + \tfrac{1}{2}\sum_\mu \int d^3\tau \tfrac{e}{mc^2}\varrho(\tau) A(\tau\mu) A(\tau\mu)$$
$$+ \tfrac{1}{2}\sum_\mu \int d^3\tau \{E^T(\tau\mu)E^T(\tau\mu) + B(\tau\mu)B(\tau\mu)\} \qquad (19.2)$$

Dabei sind $\psi(\tau s)$ und $\psi^+(\tau s)$ die Elektronen-Feldoperatoren mit dem Antikommutator

$$[\psi(\tau s), \psi^+(\tau' s')]_+ = \delta_{ss'}\,\delta(\tau-\tau') \qquad (19.3)$$

und $A(\tau\mu) \equiv A_\mu(\tau)$, $E^T(\tau\mu) \equiv E^T_\mu(\tau)$ die (hermiteschen) Operatoren des Strahlungsfeldes mit der Vertauschungsrelation**)

$$[A(\tau\mu), E^T(\tau'\mu')]_- = -i\hbar c\, \delta^T_{\mu\mu'}(\tau-\tau') . \qquad (19.4)$$

B $(\tau\mu)$ ist nur eine Abkürzung für $\varepsilon_{\mu\nu\sigma}\partial_\nu A(\tau\sigma)$.

Die Elektronen-Ladungsdichte ist

$$\varrho(\tau) := e\sum_s \psi^+(\tau s)\psi(\tau s) \qquad (19.5)$$

und der nicht-diamagnetische Stromanteil ist ($\mu_B = e\hbar/2mc$):

$$j_{n.d.}(\tau\mu) := e\hbar/2mi \sum_s \{\psi^+(\tau s)(\partial_\mu\psi(\tau s)) - (\partial_\mu\psi^+(\tau s))\psi(\tau s)\}$$
$$+ c\,\varepsilon_{\mu\nu\sigma}\partial_\nu\{\mu_B\sum_{ss'}\psi^+(\tau s')(\sigma_\sigma)_{s's}\psi(\tau s)\} \qquad (19.6)$$

---

*) Hier soll weiter das rationalisierte Gaußsche System verwendet werden: $v(\tau) = 1/4\pi\tau$

**) $\delta^T_{\mu\nu}(\tau-\tau') := \delta_{\mu\nu}\delta(\tau-\tau') - \partial_\mu\partial'_\nu\, 1/4\pi\,|\tau-\tau'|^{-1}$

Es ist angebracht, den ungestörten Hamilton-Operator noch etwas "umständlicher" zu schreiben, damit der in den Feldoperatoren multilineare Charakter von H_o klarer hervortritt:*)

$$
\begin{aligned}
H_o = &\sum_{\bar\sigma\bar s}\int d^3\bar r\, d^3\bar r\, \{(-\hbar^2/2m\,\bar\nabla^2 + \phi_o(\bar r))\,\delta(\bar r-\bar r')\,\delta_{\bar s\bar s'}\}\,\psi^+(\bar r'\bar s')\,\psi(\bar r\bar s)\\
&+\tfrac12\sum_{\bar s\bar s'}\int d^3\bar r\, d^3\bar r'\,\psi^+(\bar r\bar s)\,\psi^+(\bar r'\bar s')\,v(\bar r-\bar r')\,\psi(\bar r'\bar s')\,\psi(\bar r\bar s)\\
&-\sum_{\bar s'\bar s}\int d^3\bar r'\, d^3\bar r\sum_{\mu}\int d^3r\;\mathcal{T}_{n.d.}(r\mu;\bar r'\bar s',\bar r\bar s)\,\psi^+(\bar r'\bar s')\,\psi(\bar r\bar s)\,A(r\mu)\\
&+\tfrac12\sum_{\bar s'\bar s}\int d^3\bar r'\, d^3\bar r\sum_{\mu\mu'}\int d^3r\, d^3r'\,e^2/mc^2\;\mathcal{Q}(r\mu,r'\mu';\bar r'\bar s',\bar r\bar s)\,\psi^+(\bar r'\bar s')\,\psi(\bar r\bar s)\,A(r\mu)\,A(r'\mu')\\
&+\tfrac12\sum_{\mu\mu'}\int d^3r\, d^3r'\,\{\delta^T_{\mu\mu'}(r-r')\,E^T(r'\mu')\,E^T(r\mu)-(\nabla^2\delta^T_{\mu\mu'}(r-r'))\,A(r'\mu')\,A(r'\mu')\}
\end{aligned}
\qquad (19.7)
$$

Dabei sind die Integralkerne:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{T}_{n.d.}(r\mu;\bar r'\bar s',\bar r\bar s) &:= e/2mc\{\delta(\bar r'-r)[\tfrac{\hbar}{i}\partial_\mu\,\delta(r-\bar r)]-[\tfrac{\hbar}{i}\partial_\mu\,\delta(\bar r'-r)]\,\delta(r-\bar r)\}\,\delta_{\bar s'\bar s}\\
&\quad+\varepsilon_{\mu\nu\varsigma}\,\partial_\nu(\mu_0\sigma_\varsigma)_{\bar s'\bar s}\,\delta(\bar r'-r)\,\delta(r-\bar r)\\
\mathcal{Q}(r\mu,r'\mu';\bar r'\bar s',\bar r\bar s) &:= \delta_{\mu\mu'}\,\delta(r-r')\,\delta(\bar r'-r)\,\delta(r-\bar r)\,\delta_{\bar s'\bar s}.
\end{aligned}
$$

Um weiter unten eine übersichtliche Schreibweise zu erreichen, ist es nützlich, diese Definitionen noch etwas zu vervollständigen:**)

$$
\begin{aligned}
\mathcal{T}_{n.d.}(r\mu t;\bar r'\bar s'\bar t',\bar r\bar s\bar t) &:= \delta(\bar t'-t)\,\mathcal{T}_{n.d.}(r\mu;\bar r'\bar s',\bar r\bar s)\,\delta(t-\bar t)\\
\mathcal{Q}(r\mu t,r'\mu' t';\bar r'\bar s'\bar t',\bar r\bar s\bar t) &:= \delta(t-t')\,\delta(\bar t'-t)\,\mathcal{Q}(r\mu,r'\mu';\bar r'\bar s',\bar r\bar s)\,\delta(t-t')\\
\mathcal{N}(r t;\bar r'\bar s'\bar t';\bar r\bar s\bar t) &:= \delta(\bar t'-t)\,\delta(\bar r'-r)\,\delta(r-\bar r)\,\delta(t-\bar t)\,\delta_{\bar s'\bar s}
\end{aligned}
\qquad (19.8a\text{-}c)
$$

---

*) Es ist wegen der Transversalität von $A(r\mu)$ und $E^T(r\mu)$ sehr häufig Geschmacksache, ob man $\delta_{\mu\nu}\delta(r-r')$ oder $\delta^T_{\mu\nu}(r-r')$ schreibt.

**) Bei imaginären Zeiten (wie weiter unten immer) ist unter "$\delta(t-t')$" folgende $\mp i\hbar\beta$-periodische/antiperiodische Funktion zu verstehen

$$
\delta_{(\pm1)}(t-t') = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\{\delta(t-t'-2n(-i\hbar\beta))\pm\delta(t-t'-(2n+1)(-i\hbar\beta))\} = \tfrac{1}{-i\hbar\beta}\sum_{z_\nu} e^{-iz_\nu t}
$$

Dabei ist z_ν eine Bose/Fermi-Frequenz. Welche der beiden Funktionen zu wählen ist, ergibt sich jeweils sehr einfach (Parität der Argumentziffern s.u.):

Folgende Graphen sollen zu ihrer Kennzeichnung dienen*)

$\mathcal{N}(2;\bar{1}'\bar{1})$

$\mathcal{J}_{n.d.}(2;\bar{1}'\bar{1})$

$\mathcal{Q}(2\,2';\bar{1}'\bar{1})$

Als Vorteil dieser Einführung von reichlich vielen δ-Funktionen wird sich erweisen, daß sie die Vereinbarung einer konsequenten Einsteinschen Summationskonvention erlauben.

20. Die Green-Funktionen

Zur Bestimmung der RTK ist die Kenntnis der Responsfunktionen auf ein externes Strahlungsfeld A^{ext} erforderlich. Sie sind gegeben durch die Greenfunktionen bei $A^{ext} = 0$. Letztere sollen über die imaginärzeitigen Greenfunktionen im Rahmen des Funktionalableitungskalküls[27,28] bestimmt werden.**)

Dazu wird der ungestörte Hamilton-Operator $\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N_{el}$ um den Störoperator

$$\mathcal{H}_2(t) = \sum_{\bar{s}'\bar{s}} \int d^3\vec{r}'\, d^3\vec{r}\; U_{o_1}(\vec{r}'\bar{s}'t, \vec{r}\bar{s}t)\, \psi^+(\vec{r}'\bar{s}'t)\, \psi(\vec{r}\bar{s}t)$$
$$+ \sum_{\vec{r}} \int d^3\vec{r}\; U_{\frac{1}{2}0}(\vec{r}\mu t)\, A(\vec{r}\mu t) + \tfrac{1}{2} \sum_{\vec{r}'\vec{r}} \int d^3\vec{r}'\, d^3\vec{r}\; U_{o_0}(\vec{r}'\mu' t, \vec{r}\mu t)\, A(\vec{r}'\mu' t)\, A(\vec{r}\mu t) \qquad (20.1)$$

---

*) Eine Verwechslung mit der Elektronlinie oder der Photonenlinie ist ausgeschlossen.

**) Die Grundlage der hier vorgelegten Formulierung verdanke ich H. Hermeking.

erweitert. Dabei ist o.B.d.A. anzunehmen, daß $U_{00}(\tau'\mu',\tau\mu)$ eine symmetrische Matrix ist und $U_{00}(\tau'\mu',\tau\mu)$ und $U_{\frac{1}{2}0}(\tau\mu)$ rein transversal sind. Die Zeitentwicklung (auf der imaginären Zeitachse) der Operatoren denke man sich durch $\mathcal{H}_0$ bestimmt gemäß dem Wechselwirkungsbild, das im folgenden immer verwandt wird. Der volle Zeitentwicklungsoperator ist

$$\mathcal{U}(t) = e^{-i/\hbar\,\mathcal{H}_0 t}\,S(t)$$
$$S(t) = T_{exp}\left\{-i/\hbar\int_0^t dt'\,\mathcal{H}_1(t')\right\} \qquad (20.2)$$

Speziell ist*)

$$S(-i\hbar\beta) = T_{exp}\left\{-\tfrac{1}{2}U_{01}(1'1)\psi^+(1')\psi(1) - \tfrac{1}{2}U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})A(\underline{2}) - \tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{1}{2}U_{00}(\underline{2}'\underline{2})A(\underline{2}')A(\underline{2})\right\} \qquad (20.3)$$

Dabei stehen ungerade Ziffern für die Argumente von Elektronen- Operatoren, $1 \triangleq \tau s t$, und unterstrichene gerade Ziffern für die Argumente von Photonen-Operatoren, Strömen etc., $\underline{2} \triangleq \tau\mu t$; nichtunterstrichene gerade Ziffern werden Argumente der Ladungsdichte, Coulomb-Wechselwirkung etc. kennzeichnen, $2 \triangleq \tau t$.

Außerdem ist definiert worden**)

$$U_{01}(1'1) := U_{01}(\tau's't,\tau st)\,\delta(t'-t) \qquad \text{u.ä.}$$

Obwohl $\mathcal{U}(-i\hbar\beta)$ nicht als statistischer Operator des Systems

$$\mathcal{H}_0(t) + \mathcal{H}_1(t)$$

angesehen werden kann, da es nicht die Liouville-Gl. erfüllt, ist es angebracht, die Größe

$$Z[U] = Z(T, V, \mu; U) := \mathrm{Sp}\,\mathcal{U}(-i\beta) = \mathrm{Sp}\,e^{-\beta\mathcal{H}_0}S(-i\hbar\beta) \qquad (20.4)$$

---

*) Es gelte die Einsteinsche Symmationskonvention:
z.B. $U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})A(\underline{2}) = \int_0^{-i\hbar\beta} d\underline{2}\,U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})A(\underline{2}) = \sum_{\mu}\int_0^{-i\hbar\beta} dt \int d^3r\,U_{\frac{1}{2}}(\tau\mu t)\,A(\tau\mu t)$

**) In Situationen, wo diese Definition mit der Zeitordnung kollidieren könnte, soll immer die Regel gelten:

"Zustandssumme" und die Funktion $\Phi = -TW(T,V,\mu)$,

$$W[U] \equiv W(T,V,\mu;U) := \log Z(T,V,\mu;U),$$

"thermodynamisches Potential" zu nennen. Mit seiner Hilfe werden folgende Greenfunktionen eingeführt*):

$$G^T_{\frac{1}{2}m}(\underline{2},\underline{4},\dots,\underline{2n};13\dots(2m-1),1'3'\dots(2m-1)';U)$$

$$= \left\{-\frac{\hbar}{i}\right\}_{(m)}(-1)^m \frac{\delta}{\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2n})}\dots\frac{\delta}{\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}\frac{\delta}{\delta U_{02}((2m-1)',(2m-1))}\dots\frac{\delta}{\delta U_{02}(1'1)}W[U]$$

mit $\left\{\frac{\hbar}{i}\right\}_{(m)} = 1$, wenn m=0, und $-\hbar/i$ sonst. Im einzelnen also**):

$$G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U) = \langle A(\underline{2})\rangle_U \qquad \text{im Diagramm:}$$

$$G^T_{20}(\underline{24};U) = (-i/\hbar)\left(\langle TA(\underline{2})A(\underline{4})\rangle_U - \langle A(\underline{2})\rangle_U\langle A(\underline{4})\rangle_U\right) \text{ im Diagramm:}$$

$$G^T_{\frac{3}{2}0}(\underline{246};U) = (-i/\hbar)^2\langle T(A(\underline{2})-\langle A(\underline{2})\rangle_U)(A(\underline{4})-\langle A(\underline{4})\rangle_U)(A(\underline{6})-\langle A(\underline{6})\rangle_U)\rangle_U$$

$$G_{02}(1,1';U) = (-i/\hbar)\langle T\psi(1)\psi^+(1')\rangle \qquad \text{im Diagramm:}$$

$$G^T_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1,1';U) = (-i/\hbar)\langle TA(\underline{2})\psi(1)\psi^+(1')\rangle_U - G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)G_{02}(1,1';U)$$

$$G^T_{22}(\underline{24};1,1';U) = (-i/\hbar)\left((-i/\hbar)\langle TA(\underline{2})A(\underline{4})\psi(1)\psi^+(1')\rangle_U\right.$$

$$- G^T_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1,1';U)G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{4};U) - G^T_{\frac{1}{2}1}(\underline{4};1,1';U)G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)$$

$$\left. - \left\{(-\hbar/i)G^T_{20}(\underline{24};U) + G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{4};U)\right\}G_{02}(1,1';U)\right)$$

$$G_{02}(13,1'3';U) = (-i/\hbar)^2\langle T\psi(1)\psi(1)\psi(3)\psi^+(3')\psi^+(1')\rangle_U - G_{02}(1,1';U)G_{02}(2,2';U)$$

Eine Greenfunktion

$$\tilde{G}_{20}(\underline{22}';U) := 2\,\delta W/\delta U_{20}(\underline{22}')$$

$$= (-i/\hbar)\langle TA(\underline{2})A(\underline{2}')\rangle_U$$

hängt durch eine einfache "Punkttransformation"

$$\tilde{G}_{20}(\underline{22}';U) = G_{20}(\underline{22}';U) + (-i/\hbar)\,G_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)\,G_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}';U)$$

von den schon definierten Greenfunktionen ab.

---

*) Das Superfix "T" erinnere daran, daß die Funktionen transversal sind!

**) $\langle A(\underline{2})\rangle_U := \mathrm{sp}\,\mathcal{U}(-i\hbar\beta)A^H(\underline{2})/\mathrm{sp}\,\mathcal{U}(-i\hbar\beta) = 1/Z[U]\,\mathrm{sp}\{e^{-\beta\mathcal{H}_0}TS(-i\hbar,\beta)A(\underline{2})\}$

21. Bewegungsgln. für die niedrigsten Green-Funktionen

Für diese Greenfunktionen folgen aus dem Hamilton-Operator (19.7) die jeweiligen Bewegungsgln.

1) Mit der Einführung der freien Photon-Greenfunktionen $G^{0T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')$, gegeben durch ihre Inverse

$$\overset{-1}{G}{}^{0T}_{10}(r\mu t, r'\mu' t') := -\Box\, \delta^T_{\mu\mu'}(r-r')\,\delta(t-t') \qquad (21.1)$$

schreibt sich die Bewegungsgl. für $G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)$ folgendermaßen

$$\{\overset{-1}{G}{}^{0T}_{10}(\underline{2}\,\underline{\bar{2}}) - U_{10}(\underline{2}\,\underline{\bar{2}})\}\, G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{\bar{2}};U) = Q^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U) + U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})$$

$$G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{\bar{2}}';U)\,\{\overset{-1}{G}{}^{0T}_{10}(\underline{\bar{2}}'\,\underline{2}') - U_{10}(\underline{\bar{2}}'\,\underline{2}')\} = Q^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}';U) + U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}') \qquad (21.2a\text{-}b)$$

Dabei ist $Q^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)$ im wesentlichen der transversale Strom:

$$\begin{aligned} Q^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U) &:= -\langle {}^1\!/_c\, j^T(\underline{2}) \rangle_U \\ &= -\delta^T(\underline{2},\underline{2}')\{{}^e\!/_c\, J_{n.d.}(\underline{2}';1',1)\,{}^\hbar\!/_i\, G_{01}(1,1';U) \\ &\quad - {}^{e^2}\!/_{mc^2}\, \mathcal{Q}(\underline{2}'\underline{\bar{2}};1'1)\,{}^\hbar\!/_i\,(G^T_{\frac{1}{2}1}(\underline{\bar{2}};1,1';U) + G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{\bar{2}};U)\,G_{01}(1,1';U))\} \end{aligned} \qquad (21.3)$$

2) Durch Variation der Bewegungsgl. von $G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)$ nach $U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}')$ bzw. nach $U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})$ folgt diejenige für $G^T_{10}(\underline{2},\underline{2}';U)$

$$\{\overset{-1}{G}{}^{0T}_{10}(\underline{2}\,\underline{\bar{2}}) - U_{10}(\underline{2}\,\underline{\bar{2}})\}\, G^T_{10}(\underline{\bar{2}}\,\underline{2}';U) = \delta^T(\underline{2},\underline{2}') + \delta Q^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U)/\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}')$$

$$G^T_{10}(\underline{2}\,\underline{\bar{2}}';U)\{\overset{-1}{G}{}^{0T}_{10}(\underline{\bar{2}}'\underline{2}') - U_{10}(\underline{\bar{2}}'\underline{2}')\} = \delta^T(\underline{2},\underline{2}') + \delta Q^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}';U)/\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) \qquad (21.4a\text{-}b)$$

3) Mit Einführung der - unter Einschluß des Ionenpotentials $\phi_0(\underline{r})$ - "freien" Elektronen-Greenfunktion $G^0_{01}(1,1')$, gegeben durch:

$$\overset{-1}{G}{}^0_{01}(rst, r's't') := \{-{}^\hbar\!/_i\, {}^\partial\!/_{\partial t} + {}^{(\hbar\nabla)^2}\!/_{2m} + \mu - \phi_0(\underline{r})\}\,\delta(r-r')\,\delta(t-t')\,\delta_{ss'} \qquad (21.5)$$

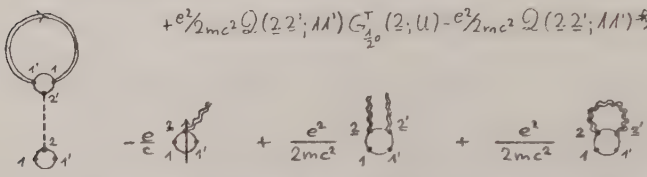
schreibt sich die Bewegungsgl. für die Ein-Elektron-Funktion:

$$\{\overset{-1}{G}{}^0_{01}(1,\bar{1}) - U_{01}(1,\bar{1}) - Q^{MF}_{01}(1,\bar{1};U)\}\, G_{01}(\bar{1},1';U) = \delta(1,1') + E(1,1';U)$$

$$G_{01}(1,\bar{1}';U)\{\overset{-1}{G}{}^0_{01}(\bar{1}',1') - U_{01}(\bar{1}',1') - Q^{MF}_{01}(\bar{1}',1';U)\} = \delta(1,1') + E(1,1';U) \qquad (21.6a\text{-}b)$$

Dabei ist $Q^{MF}_{\sigma\sigma'}(\lambda\lambda';u)$ der "mean-field"-Anteil der Selbstenergie des Elektrons $(V(22') := e^2 v(\underline{r}-\underline{r}')\delta(t-t'))$:

$$Q^{MF}_{\sigma\sigma'}(\lambda\lambda';u) := \mathcal{N}(2,\lambda\bar{\lambda})V(22')\mathcal{N}(2',\bar{\lambda}\lambda')\,{}^{*}\!/_{i}\,G_{\sigma\sigma'}(\bar{\lambda},\lambda';u) - {}^{e}\!/_{c}\,\mathcal{T}_{nd.}(\underline{2};\lambda\lambda')\,G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};u)$$
$$+ {}^{e^2}\!/_{2mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\lambda')\,G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};u) - {}^{e^2}\!/_{2mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\lambda')\,{}^{*}\!/_{i}\,G^{T}_{00}(\underline{2}\underline{2}';u)$$



(21.7)

Die für den Augenblick eingeführte Funktion E (1,1') ist:

$$E(\lambda,\lambda';u) := \mathcal{N}(2,\lambda\bar{\lambda})V(22')\mathcal{N}(2',33')\,{}^{*}\!/_{i}\,G_{\sigma_2}(\bar{\lambda}3,\lambda'3';u) - {}^{e}\!/_{c}\,\mathcal{T}_{nd.}(\underline{2},\lambda\lambda')\,G^{T}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\underline{2};\bar{\lambda},\lambda';u)$$
$$+ {}^{e^2}\!/_{mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\bar{\lambda})\,G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};u)\,G^{T}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\underline{2}';\bar{\lambda}\lambda';u) - {}^{e^2}\!/_{2mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\bar{\lambda})\,{}^{*}\!/_{i}\,G^{T}_{\lambda\lambda}(\underline{2}\underline{2}',\bar{\lambda}\lambda';u) \tag{21.8}$$

oder durch Rückgriff auf die Definition der Greenfunktionen:

$$E(\lambda,\lambda';u) := -\mathcal{N}(2,\lambda\bar{\lambda})V(22')\mathcal{N}(2',33')\,{}^{*}\!/_{i}\,\delta G_{\sigma_2}(3,3';u)/\delta U_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda}) + {}^{e}\!/_{c}\,\mathcal{T}_{nd.}(\underline{2},\lambda\bar{\lambda})\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};u)/\delta U_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda})$$
$$- {}^{e^2}\!/_{2mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\bar{\lambda})\delta(G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};u)G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}';u))/\delta U_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda}) + {}^{e^2}\!/_{2mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\bar{\lambda})\,{}^{*}\!/_{i}\,\delta G^{T}_{00}(\underline{2}\underline{2}';u)/\delta U_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda}),$$

also

$$E(\lambda,\lambda';u) = -\,\delta Q^{MF}_{\sigma\sigma'}(\lambda\bar{\lambda};u)/\delta U_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda}).$$

Daher folgt endlich die Bewegungsgl. für $G_{\sigma\sigma'}(\lambda,\lambda';u)$:

$$\{\overleftarrow{G}^{0}_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda}) - U_{\sigma\sigma'}(\lambda,\bar{\lambda}) - Q^{MF}_{\sigma\sigma'}(\lambda\bar{\lambda};u)\}\,G_{\sigma\sigma'}(\bar{\lambda},\lambda';u) = \delta(\lambda,\lambda') - \delta Q^{MF}_{\sigma\sigma'}(\lambda\bar{\lambda};u)/\delta U_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda})$$

$$G_{\sigma\sigma'}(\lambda,\bar{\lambda};u)\{\overleftarrow{G}^{0}_{\sigma\sigma'}(\bar{\lambda},\lambda') - U_{\sigma\sigma'}(\bar{\lambda},\lambda') - Q^{MF}_{\sigma\sigma'}(\bar{\lambda}\lambda';u)\} = \delta(\lambda,\lambda') - \delta Q^{MF}_{\sigma\sigma'}(\lambda\bar{\lambda};u)/\delta U_{\sigma\sigma'}(\lambda',\bar{\lambda}).$$

Die Bewegungsgln. verknüpfen "niedrigere" Greenfunktionen mit "höheren". Statt auf diese Weise eine Hierarchie von gekoppelten Bewegungsgln. zu erzeugen, ist es möglich, zu einem Verfahren überzugehen, das auf ein äquivalentes, aber endliches System gekoppelter "partieller Funktionalableitungsgln." führt.

---

*) Solche Diagramme mögen ausschließlich dazu dienen, die zugehörigen Gln. leichter lesbar zu machen. Insbesondere

22. Legendre-Transformation $(U_{\frac{1}{2}0}, U_{10}, U_{01}) \rightleftharpoons (G^{T}_{\frac{1}{2}0}, G^{T}_{10}, G_{01})$

Die bisher gewonnenen Bewegungsgln. (21.2,4,6) können aufgefaßt werden als ein (überbestimmtes) partielles Funktionalableitungs-Gleichungssystem $F(U,W,\delta W/\delta U,\ldots) = 0$ in Analogie zu einem System partieller Differentialgln. Dabei sind $U_{\frac{1}{2}0}$, U_{10} , U_{01} die unabhängigen und W[U] nebst seinen Ableitungen die abhängigen Variablen. W tritt explizit nicht auf, jene partiellen Ableitungen bis zur dritten Ordnung. Soweit die Analogie mit dem System partieller Differentialgln. zulässig ist, wird wieder eine (vollständige oder auch nur partielle) Legendre-Transformation von den unabhängigen Variablen $U_{\frac{1}{2}0}$, U_{10} , U_{01} zu unabhängigen Variablen $G_{\frac{1}{2}0}$, G_{10} , G_{01} möglich sein.

Es wird also angenommen, daß das Gleichungssystem

$$G^{T}_{\frac{1}{2}0}(2) = -\tfrac{i}{\hbar}\,\delta W/\delta U_{\frac{1}{2}0}(2)$$

$$\tilde{G}^{T}_{10}(2\,2') = 2\,\partial W/\delta U_{10}(2\,2')$$

$$G_{01}(1,1') = -\,\delta W/\delta U_{01}(1',1)$$

eine eineindeutige Beziehung zwischen G's und U's gibt:

$$U_{\frac{1}{2}0} = U_{\frac{1}{2}0}[G^{T}_{\frac{1}{2}0}, \tilde{G}^{T}_{10}, G_{01}]$$

$$U_{10} = U_{10}[G^{T}_{\frac{1}{2}0}, \tilde{G}^{T}_{10}, G_{01}]$$

$$U_{01} = U_{01}[G^{T}_{\frac{1}{2}0}, \tilde{G}^{T}_{10}, G_{01}]$$

---

soll mit der Anordnung der Punkte auf dem Papier nie eine Zeitordnung verbunden werden.

Die Lösung W[U] der betrachteten Gln. ist gewonnen, wenn

$$\underline{Q}[G^{\tau}_{\frac{1}{2}0}, \tilde{G}^{\tau}_{10}, G_{01}] = U_{\frac{1}{2}0}(-i\not{*})G^{\tau}_{\frac{1}{2}0} + U_{10}\cdot\tfrac{1}{2}\tilde{G}^{\tau}_{10} - U_{01}G_{01} - W$$

als von den unabhängigen Variablen $G^{\tau}_{\frac{1}{2}0}$, $\tilde{G}^{\tau}_{10}$, G_{01} *)

abhängige Variablen gegeben ist. Denn da die Gln.

$$\delta\underline{Q}/\delta G^{\tau}_{\frac{1}{2}0}(2) = (-i\not{*})U_{\frac{1}{2}0}(2)$$

$$\delta\underline{Q}/\delta \tilde{G}^{\tau}_{10}(2\,2') = \tfrac{1}{2}\,U_{10}(2\,2')$$

$$\delta\underline{Q}/\delta G_{01}(1,1') = -\,U_{01}(1',1)$$

wieder dieselbe eineindeutige Beziehung zwischen den U's und G's definieren, ist durch

$$W = U_{\frac{1}{2}0}(-i\not{*})\,G^{\tau}_{\frac{1}{2}0} + U_{10}\cdot\tfrac{1}{2}\,\tilde{G}^{\tau}_{10} - U_{01}G_{01} - \underline{Q}$$

auch W = W[U] gewonnen.

Wie bestimmt man nun $\underline{Q}=\underline{Q}[G]$? Das bei partiellen Differentialgleichungssystemen mögliche Verfahren, aus $F(U,W,\delta W/\delta U,\ldots)=0$ ein $\phi(G,\underline{Q},\delta\underline{Q}/\delta G\ldots)=0$ zu erhalten, einfach indem man U und W samt seinen Ableitungen durch G und $\underline{Q}$ samt seinen Ableitungen ausdrückt, scheint hier nicht anwendbar:
Die Invertierung der Matrizen aus den höheren partiellen Ableitungen läßt sich nicht direkt übertragen. Deshalb sollen zunächst die drei Bewegungsgln. (die das System F=0 bilden) umgeformt werden durch Einführung zweier Hilfsgrößen: der Photon-Selbstenergie $Q^{\tau}_{10}(2\,2')$ und der Elektron-Selbstenergie $Q_{01}(1,1')$:

---

*) Der Übergang zu unabhängigen Variablen $G^{\tau}_{\frac{1}{2}0}$, G^{τ}_{10} , G_{01} erfolgt durch eine einfache Punkttransformation (cf.p. 72). $\tilde{G}^{\tau}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ und $G^{\tau}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ sollen immer symmetrisch in $\underline{2}$ und $\underline{2}'$ sein.

Im Sinne einer partiellen Legendre-Transformation werde $Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2})$ als Funktion von $G^{T}_{\frac{1}{2}0}$, U_{10} , U_{01} angesehen. Dann folgt:

$$(\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})/\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}'))_{U_{10},U_{01}} = (\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})/\delta G_{\frac{1}{2}0}(\underline{4}))_{U_{10},U_{01}} \cdot (\delta G_{\frac{1}{2}0}(\underline{4})/\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}'))_{U_{10},U_{01}}$$

$$= Q^{T}_{10}(\underline{2},\underline{4})\, G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{2}')$$

mit der "Photon-Selbstenergie":

$$Q^{T}_{10}(\underline{2},\underline{2}') := (\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})/\delta G_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}'))_{U_{10},U_{01}} . \qquad (22.1)$$

Mit ihrer Hilfe schreibt sich die Bewegungsgl. für $G^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$:

$$\{\vec{G}^{-1\,T}_{10}(\underline{2}\,\bar{\underline{2}}) - U_{10}(\underline{2}\,\bar{\underline{2}}) - Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\bar{\underline{2}})\}\, G^{T}_{10}(\bar{\underline{2}}\,\underline{2}') = \delta^{T}(\underline{2}\,\underline{2}')$$

$$G^{T}_{10}(\underline{2}\,\bar{\underline{2}}')\{\vec{G}^{-1\,T}_{10}(\bar{\underline{2}}'\underline{2}') - U_{10}(\bar{\underline{2}}'\underline{2}') - Q^{T}_{10}(\bar{\underline{2}}'\underline{2}')\} = \delta^{T}(\underline{2}\,\underline{2}') \qquad (22.2a\text{-}b)$$

Da die Invertierbarkeit von $G^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ gesichert ist,[3] folgt

$$\vec{G}^{-1\,T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') = \vec{G}^{-1\,oT}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') - U_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') - Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') \qquad (22.2c)$$

und die Symmetrie-Relation: $Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}') = Q^{T}_{10}(\underline{2}'\underline{2})$.

Wie man z.B. mit Argumenten der Störungstheorie einsieht, gilt analog

$$-\delta Q^{MF}_{01}(\lambda\bar{\lambda})/\delta U_{01}(\lambda'\bar{\lambda}) = Q^{MF}_{01}(\lambda,\bar{\lambda})\, G_{01}(\bar{\lambda},\lambda') = G_{01}(\lambda,\bar{\lambda})\, Q^{MF}_{01}(\bar{\lambda},\lambda'),$$

so daß mit folgender Definition der Elektron-Selbstenergie

$$Q_{01}(\lambda,\lambda') := Q^{HF}_{01}(\lambda\lambda') + Q^{MF}_{01}(\lambda,\lambda')$$

die Bewegungsgl. für $G_{01}(1,1')$ lautet:

$$\{\vec{G}^{-1\,0}_{01}(\lambda,\bar{\lambda}) - U_{01}(\lambda,\bar{\lambda}) - Q_{01}(\lambda,\bar{\lambda})\}\, G_{01}(\bar{\lambda},\lambda') = \delta(\lambda,\lambda')$$

$$G_{01}(\lambda,\bar{\lambda}')\{\vec{G}^{-1\,0}_{01}(\bar{\lambda}',\lambda') - U_{01}(\bar{\lambda}',\lambda') - Q_{01}(\bar{\lambda}',\lambda')\} = \delta(\lambda,\lambda') \qquad (22.3a\text{-}b)$$

oder auch

$$\vec{G}^{-1}_{01}(\lambda,\lambda') = \vec{G}^{-1\,0}_{01}(\lambda,\lambda') - U_{01}(\lambda,\lambda') - Q_{01}(\lambda,\lambda') \qquad (22.3c)$$

Mit den Hilfsfunktionen $Q_{\frac{1}{2}0}$, Q_{10} , Q_{01} läßt sich aus den Bewegungsgln. (d.h. dem System $\underline{F}(U,W,\ldots)=0$) das gesuchte partielle Funktionalgl.-System $\Phi(G,Q,\ldots)=0$ herleiten:

$$\begin{array}{|l|l|l|}
\hline
\delta Q/\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) & = (-i/\hbar)(U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) + U_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\, G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}')) & = i/\hbar\,(Q_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) - \vec{G}^{-1\,oT}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\, G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}') \\
\delta Q/\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') & = \tfrac{1}{2}\, U_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') & = -\tfrac{1}{2}\,(\vec{G}^{-1\,T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') - \vec{G}^{-1\,oT}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') + Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')) \\
\delta Q/\delta G_{01}(\lambda,\lambda') & = -\,U_{01}(\lambda',\lambda) & = -\,\vec{G}^{-1\,0}_{01}(\lambda',\lambda) + \vec{G}^{-1}_{01}(\lambda',\lambda) + Q_{01}(\lambda',\lambda) \\
\hline
\end{array} \qquad (22.4)$$

Das Gleichungssystem für $\underline{Q}$ ist überbestimmt; da es aber nach Konstruktion lösbar ist, müssen die rechten Seiten die Integrabilitätsbedingungen (= Schwarzscher Satz für die 2. Ableitungen von $\underline{Q}$) erfüllen. Aus ihnen folgen drei Konsistenz-Relationen für die Hilfsgrößen:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}\,\frac{\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G_{01}(1,1')} &= \frac{\delta Q_{01}(1',1)}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})} \\
-\frac{i}{\hbar}\,\frac{\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')} &= \frac{1}{2}\,\frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})} \\
\frac{\delta Q_{01}(1',1)}{\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')} &= -\frac{1}{2}\,\frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}{\delta G_{01}(1,1')}
\end{aligned} \tag{22.5}$$

Darüber hinaus folgt aus obigem Gleichungssystem für das "Funktional-Differential" $\delta\,\underline{Q}$:

$$\begin{aligned}
\delta\Omega(G^{T}_{\frac{1}{2}0}, G^{T}_{10}, G_{01}) = \{&-\tfrac{i}{\hbar}\,\bar{G}'^{0T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\,G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})\,\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) - \tfrac{1}{2}\{\bar{G}'^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') - \bar{G}'^{0T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\}\,\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') \\
&+\{\bar{G}'_{01}(1',1) - \bar{G}'^{0}_{01}(1',1)\}\,\delta G_{01}(1,1')\} \\
&+\{\tfrac{i}{\hbar}\,Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})\,\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) - \tfrac{1}{2}\,Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\,\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') + Q_{01}(1',1)\,\delta G_{01}(1,1')\} \\
&=: \delta Q^{(1)}(G^{T}_{\frac{1}{2}0}, G^{T}_{10}, G_{01}) + \delta Q^{(2)}(G^{T}_{\frac{1}{2}0}, G^{T}_{10}, G_{01})
\end{aligned} \tag{22.6}$$

Offensichtlich sind die gemischten Ableitungen von $\delta Q^{(1)}$ alle gleich Null und diejenigen von $\delta\,\underline{Q}^{(2)}$ gleich denen von $\delta\,\underline{Q}$. Das heißt, die $\delta Q^{(i)}$ sind totale Funktionaldifferentiale und definieren Funktionale

$$Q^{(i)} = \underline{Q}^{(i)}(G^{T}_{\frac{1}{2}0}, G^{T}_{10}, G_{01}).$$

Wegen des Verschwindens der gemischten Ableitungen zerlegt $Q^{(1)}$ sich offensichtlich weiter:

$$Q^{(1)}(G^{T}_{\frac{1}{2}0}, G^{T}_{10}, G_{01}) = Q^{(1)}_{\frac{1}{2}0}(G^{T}_{\frac{1}{2}0}) + Q^{(1)}_{10}(G^{T}_{10}) + Q^{(1)}_{01}(G_{01}).$$

Das Funktional $\underline{Q}^{(2)}$ ist nach Konstruktion ein Potential für die Hilfsgrößen:

$$Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\delta Q^{(2)}}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}\,,\quad Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') = -2\,\frac{\delta Q^{(2)}}{\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}\,,\quad Q_{01}(1',1) = \frac{\delta Q^{(2)}}{\delta G_{01}(1,1')} \tag{22.7}$$

Man kann gemäß der analogen Aufgabe in der Analysis nun $\underline{Q}^{(2)}$ als "Kurven-Integral" aus den Ableitungen konstruieren. Es mag genügen, sich $\underline{Q}^{(2)}$ vorzustellen als das "unbestimmte Funktional-Integral"

$$\underline{Q}^{(2)}(G^T_{\frac{1}{2}0}, G^T_{\Lambda 0}, G_{0\Lambda}) = \int^{G_{0\Lambda}} \delta \bar{G}_{0\Lambda}(1,1')\, Q_{0\Lambda}(1',1; G^T_{\frac{1}{2}0}, G^T_{\Lambda 0}, \bar{G}_{0\Lambda})$$

oder ähnlich. In dieser Form ist $\underline{Q}^{(2)}$ ein Hilfsmittel, konsistente Näherungen für $Q^T_{\frac{1}{2}0}$, $Q^T_{\Lambda 0}$ und $Q_{0\Lambda}$ zu konzipieren.

Wie gewinnt man nun $Q^T_{\frac{1}{2}0}$, $Q^T_{\Lambda 0}$ und $Q_{0\Lambda}$ als Funktionen von $G^T_{\frac{1}{2}0}$, $G^T_{\Lambda 0}$ und $G_{0\Lambda}$?

23. Einführung und Bestimmung von Hilfsfunktionen (Vertices etc.)

Vor der Beantworung dieser Frage sollen zunächst noch vier weitere Hilfsfunktionen (Elektronen-Wechselwirkungen, Vertices) eingeführt werden. Ihr Zweck ist es, neben den als unabhängigen Variablen fungierenden $G^T_{\frac{1}{2}0}$, $G^T_{\Lambda 0}$ und $G_{0\Lambda}$ alle "höheren" Green-Funktionen*) zu eliminieren (indem ihnen "die Beine ausgezogen" werden). Nämlich:

$$Q^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}\,\underline{4}\,\underline{6}) := \left(\frac{\delta Q^T_{\Lambda 0}(\underline{2}\,\underline{4})}{\delta G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{6})}\right)_{U_{\Lambda 0}, U_{0\Lambda}} \qquad Q^T_{\Lambda\Lambda}(\underline{2}\,\underline{4}; 1,3) := \left(\frac{\delta Q^T_{\Lambda 0}(\underline{2}\,\underline{4})}{\delta G_{0\Lambda}(3,1)}\right)_{U_{\frac{1}{2}0}, U_{\Lambda 0}}$$

$$Q^T_{\frac{1}{2}\Lambda}(\underline{2}; 1,1') := \left(\frac{\delta Q_{0\Lambda}(1,1')}{\delta G^T_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}\right)_{U_{\Lambda 0}, U_{0\Lambda}} \qquad Q_{02}(13, 1'3') := \left(\frac{\delta Q_{0\Lambda}(1,1')}{\delta G_{0\Lambda}(3',3)}\right)_{U_{\frac{1}{2}0}, U_{\Lambda 0}} \qquad (23.1a\text{-}d)$$

*) mit Ausnahme von G_{02}

Leitet man die obigen drei Bewegungsgln.

(I) $\{\vec{G}^{oT}_{10}(\underline{2}\bar{2}) - U_{10}(\underline{2}\bar{2})\}\, G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\bar{2};U) = Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2};U) + U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})$

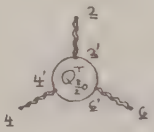
(II) $\{\vec{G}^{oT}_{00}(\underline{2}\,\underline{2}') - U_{00}(\underline{2}\,\underline{2}') - Q^{T}_{0c}(\underline{2}\,\underline{2}')\}\, G^{T}_{00}(\bar{2}\,\underline{2}';U) = \delta^{T}(2,2')$

(III) $\{\vec{G}^{o}_{01}(\lambda,\bar{\lambda}) - U_{01}(\lambda,\bar{\lambda}) - Q_{01}(\lambda,\bar{\lambda})\}\, G_{01}(\bar{\lambda},\lambda';U) = \delta(\lambda,\lambda')$

funktional ab, so erhält man:

1) durch Ableitung von (II) nach $U_{\frac{1}{2}0}$:

$$G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}\,\underline{4}\,\underline{6}) = G^{T}_{00}(\underline{2}\,\underline{2}')\, G^{T}_{00}(\underline{4}\,\underline{4}')\, G^{T}_{00}(\underline{6}\,\underline{6}')\, Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}'\,\underline{4}'\,\underline{6}')$$

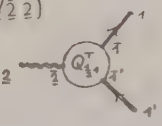


(23.2)

"Beine-Ausziehen"

2) durch Ableitung von (III) nach $U_{\frac{1}{2}0}$:

$$(-i\hbar)\, G^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};\lambda,\lambda') = G_{01}(\lambda,\bar{\lambda})\, Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\bar{2};\bar{\lambda},\lambda')\, G_{01}(\bar{\lambda}',\lambda')\, G^{T}_{00}(\bar{2}\,\underline{2})$$

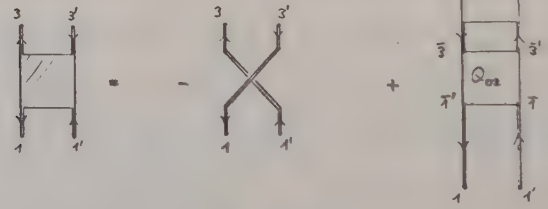


(23.3)

3) durch Ableitung von (III) nach U_{01} :

$$\{-\vec{G}_{01}(\lambda',\bar{\lambda})\,\vec{G}_{01}(\bar{\lambda}',\lambda) + Q_{02}(\lambda'\bar{\lambda}',\lambda\bar{\lambda})\}\, G_{02}(\bar{\lambda}3,\bar{\lambda}'3') = \delta(\lambda',3')$$

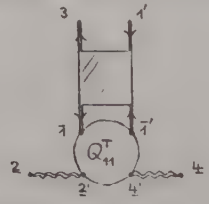
$$\Leftrightarrow G_{02}(\lambda 3,\lambda'3') = -G_{01}(\lambda,3')\, G_{01}(3,\lambda') + G_{01}(\lambda,\bar{\lambda}')\, G_{01}(\bar{\lambda},\lambda')\, Q_{02}(\bar{\lambda}'\bar{3}',\bar{\lambda}\bar{3})\, G_{02}(\bar{3}3,\bar{3}'3')$$



(23.4)

4) durch Ableitung von (II) nach U_{01} :

$$G^{T}_{11}(\underline{2}\,\underline{4};\lambda,\lambda') = G^{T}_{00}(\underline{2}\,\underline{2}')\, G^{T}_{00}(\underline{4}\,\underline{4}')\, Q^{T}_{11}(\underline{2}'\underline{4}';\bar{\lambda}',\bar{\lambda})\, G_{02}(\bar{\lambda}3,\bar{\lambda}'\lambda')$$



(23.5)

Wie gewinnt man die 8 "Hilfsgrößen" G_{02} ; $Q^{T}_{\frac{1}{2}0}$, Q^{T}_{00} , Q_{01} ; $Q^{T}_{\frac{1}{2}1}$, Q^{T}_{11} , Q_{02} ; $Q^{T}_{\frac{3}{2}0}$?

Mit der Angabe von 8 (partiellen Funktionalableitungs-) Gln. für die 8 "Hilfsgrößen" G_{02} ; $Q^{T}_{\frac{1}{2}0}$, Q^{T}_{10} , Q_{01} ; $Q^{T}_{\frac{1}{2}1}$, Q^{T}_{11} , Q_{02} ; $Q^{T}_{\frac{3}{2}0}$ in den unabhängigen Variablen $G^{T}_{\frac{1}{2}0}$, G^{T}_{10} , G_{01} ist die Dynamik des Systems "im Prinzip" vollständig beschrieben*):

1) $$G_{02}(\lambda 3,\lambda'3') = -G_{01}(\lambda,3')G_{01}(3,\lambda') + G_{01}(\lambda,\bar{\lambda}')G_{01}(\bar{\lambda},\lambda')Q_{02}(\lambda'\bar{3}',\bar{\lambda}\bar{3})G_{02}(\bar{3}3,\bar{3}'3') \qquad (23.6)$$

ist gerade hergeleitet worden.

2) $$Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{3}) = -\delta^{T}(\underline{3},\underline{2}')\{(\%\mathcal{T}_{ind.}(\underline{2}';\lambda'\lambda) - e^2/mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}'\underline{2}'';\lambda'\lambda)G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}''))\hbar/i\,G_{01}(\lambda,\lambda')$$
$$+ e^2/mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}'\underline{2}'';\lambda'\lambda)G^{T}_{10}(\underline{2}''\underline{\bar{2}}'')Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{\bar{2}}'';\bar{\lambda}'\bar{\lambda})G_{01}(\lambda,\bar{\lambda}')G_{01}(\bar{\lambda},\lambda')\} \qquad (23.7)$$

folgt unmittelbar aus der Definition von $Q^{T}_{\frac{1}{2}0}$ mit Hilfe des gerade eingeführten "Beine-Ausziehens" bei höheren Green-Funktionen;

3) $$Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}') = \frac{\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}')} + \frac{\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{T}_{10}(\underline{4}\underline{4}')}\,G^{T}_{10}(\underline{4}\underline{6})\,G^{T}_{10}(\underline{4}'\underline{6}')\,Q^{T}_{\frac{3}{2}0}(\underline{6}\underline{6}'\underline{2}')$$
$$+ \frac{\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G_{01}(\lambda,\lambda')}\,G_{01}(\lambda,\bar{\lambda}')\,Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';\bar{\lambda}',\bar{\lambda})\,G_{01}(\bar{\lambda},\lambda') \qquad (23.8)$$

folgt durch Ausführung der Ableitung $(\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})/\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}'))_{U_{10},U_{01}}$ nach der Kettenregel, "Ausziehen der Beine" und Abspalten eines Faktors G^{T}_{10} .

4) $$Q_{01}(\lambda,\lambda') = \mathcal{N}(2,\lambda\lambda')V(2,2')\mathcal{N}(2';\bar{\lambda}\bar{\lambda}')\hbar/i\,G_{01}(\bar{\lambda},\bar{\lambda}') - e/c\,\mathcal{T}_{ind.}(\underline{2};\lambda\lambda')G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})$$
$$+ e^2/2mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\lambda')G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}') - e^2/2mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}';\lambda\lambda')\hbar/i\,G^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$$
$$- \mathcal{N}(2,\lambda\bar{\lambda})V(2,2')\mathcal{N}(2',\bar{\lambda}'\lambda')\hbar/i\,G_{01}(\bar{\lambda},\bar{\lambda}')$$
$$+ \mathcal{N}(2,\lambda\bar{\lambda})V(2,2')\mathcal{N}(2',\bar{3}\bar{3}')\,G_{02}(3\bar{3},3'\bar{3}')Q_{02}(\bar{\lambda}'3',\lambda'3)\hbar/i\,G_{01}(\bar{\lambda},\bar{\lambda}')$$
$$+ e/c\,\mathcal{T}_{ind.}(\underline{2};\lambda\bar{\lambda})\hbar/i\,G^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')\,Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';\bar{\lambda}'\lambda')\,G_{01}(\bar{\lambda},\bar{\lambda}')$$
$$- e^2/mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{\bar{2}};\lambda\bar{\lambda})\,G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{\bar{2}})\,\hbar/i\,G^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';\bar{\lambda}'\lambda')\,G_{01}(\bar{\lambda},\bar{\lambda}') \qquad (23.9)$$
$$+ e^2/2mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{\bar{2}};\lambda\bar{\lambda})\,G^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')\,G^{T}_{10}(\underline{\bar{2}}\underline{\bar{2}}')Q^{T}_{11}(\underline{2}'\underline{\bar{2}}';\lambda'\bar{\lambda}')\,\hbar/i\,G_{01}(\bar{\lambda},\bar{\lambda}')$$
$$- e^2/2mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{\bar{2}};\lambda\bar{\lambda})\,G^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')G^{T}_{10}(\underline{\bar{2}}\underline{\bar{2}}')Q^{T}_{11}(\underline{2}'\underline{\bar{2}}',\bar{3}\bar{3}')\,G_{02}(3\bar{3},3'\bar{3}')Q_{02}(\bar{\lambda}'3',\lambda'3)\hbar/i\,G_{01}(\bar{\lambda},\bar{\lambda}')$$

---

*) unter $\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})/\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}')$ werde immer verstanden $(\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})/\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}'))_{G^{T}_{11},G_{01}}$ u.ä.

folgt aus den Definitionen von $Q^{MF}_{o1}(1,1')$ und $E(1,1')$ in Gln.(21.7-8), Einsetzen der Gl. für G_{o1} in $E(1,1')$, "Ausziehen der Beine" und Abspaltung eines Faktors G_{o1} von $E(1,1')$.

5) $$Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1,1') = \frac{\delta Q_{o1}(1,1')}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})} + \frac{\delta Q_{o1}(1,1')}{\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}\, G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{4})\, G^{T}_{10}(\underline{2}'\underline{4}')\, Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{4}\,\underline{4}'\underline{2}) + \frac{\delta Q_{o1}(1,1')}{\delta G_{o1}(3,3')}\, G_{o1}(3,\bar{3}')\, G_{o1}(\bar{3},3)\, Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2},\bar{3}'\bar{3}) \qquad (23.10)$$

folgt durch Ausführung der Ableitung $(\delta Q_{o1}(1,1')/\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}))_{U_{10},U_{o1}}$ nach der Kettenregel, "Ausziehen der Beine" und Abspalten von G^{T}_{10}.

6) $$Q^{T}_{11}(\underline{2}\,\underline{2}';1',1) = \frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{4})}\, \frac{k}{i}\, G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')\, Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{4}';1',1) - \frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{4})}\, \frac{k}{i}\, G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')\, Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{4}';3'3)\, G_{o1}(3,5')\, G_{o1}(5,3')\, Q_{o2}(5'1',51) + \frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}{\delta G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{6})}\, G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')\, G^{T}_{10}(\underline{6}\,\underline{6}')\, Q^{T}_{11}(\underline{4}'\underline{6}';1'1) + \frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}{\delta G_{o1}(1,1')} \qquad (23.11)$$

folgt durch Ausführung der Ableitung $-(\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')/\delta U_{o1}(3,3))_{U_{\frac{1}{2}0},U_{10}}$ nach der Kettenregel, "Ausziehen der Beine" und anschließendem Abspalten eines Faktors G_{o2}.

7) $$Q_{o2}(1'3',13) = \frac{\delta Q_{o1}(1',1)}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}\, \frac{k}{i}\, G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\, Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';3'3) - \frac{\delta Q_{o1}(1'1)}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}\, \frac{k}{i}\, G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\, Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';5'5)\, G_{o1}(5,7')\, G_{o1}(7,5')\, Q_{o2}(7'3',73) + \frac{\delta Q_{o1}(1'1)}{\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{4})}\, G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\, G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')\, Q^{T}_{11}(\underline{2}'\underline{4}';3',3) + \frac{\delta Q_{o1}(1'1)}{\delta G_{o1}(3,3')} \qquad (23.12)$$

folgt durch Ausführung der Ableitung $-(\delta Q_{o1}(1',1)/\delta U_{o1}(3',3))_{U_{\frac{1}{2}0},U_{10}}$ nach der Kettenregel, "Ausziehen der Beine" und anschließendem Abspalten eines Faktors G_{o1}.

8) $$Q^{T}_{\frac{3}{2}0}(\underline{2}\,\underline{4}\,\underline{6}) = \frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{4})}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{6})} + \frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{4})}{\delta G^{T}_{00}(\underline{5}\,\underline{4})}\, G^{T}_{00}(\underline{5}\,\underline{5}')\, G^{T}_{00}(\underline{4}\,\underline{4}')\, Q^{T}_{\frac{3}{2}0}(\underline{5}'\,\underline{4}'\,\underline{6})$$

$$+ \frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{4})}{\delta G_{01}(1,1')}\, G_{01}(1,3')\, G_{01}(3,1')\, Q^{T}_{\frac{1}{2}1}(6,3',3) \qquad (23.13)$$

folgt durch Ausführung der Ableitung $(\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{4})/\delta U_{\frac{1}{2}0}(\underline{6}))_{U_{10}U_{01}}$ nach der Kettenregel, "Ausziehen der Beine" und anschließendem Abspalten eines Faktors G^{T}_{10} .

Außerdem müssen, wie oben diskutiert, die Integrabilitätsbedingungen erfüllt sein:

$$\frac{i}{\hbar}\frac{\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G_{01}(1,1')} = \frac{\delta Q_{01}(1'1)}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}$$

$$-\frac{i}{\hbar}\frac{\delta Q^{T}_{\frac{3}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')} = \frac{1}{2}\frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')}{\delta G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}$$

$$\frac{\delta Q_{01}(1'1)}{\delta G^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')} = -\frac{1}{2}\frac{\delta Q^{T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}{\delta G_{01}(1,1')} \qquad (23.14)$$

Als Vorteil dieser Formulierung der Dynamik des Elektron-Photon-Systems erweist es sich[28], daß in ihm ein Iterationsverfahren - kontrolliert durch Konsistenzbedingungen - möglich ist, um bei der "Entkopplung" sukzessive Prozesse immer höherer Ordnung in e/c zu berücksichtigen.

24. Die Stromdichte-Korrelationsfunktionen

Wie sind nun die gesuchten Korrelationsfunktionen*)

$$\delta^{T}(\underline{2},\underline{2}')\{\tfrac{1}{2}\langle T j_{\delta}(\underline{2})\, j_{\delta}(\underline{2}')\rangle - e^{2}_{m}\langle \varrho(\underline{2})\rangle \delta(\underline{2},\underline{2}')\}\delta^{T}(\underline{2}',\underline{2}') \qquad (24.1)$$

durch die oben diskutierten Green-Funktionen gegeben?

---

*) Die letzlich gesuchte retardierte Funktion hängt mit der

Das durch $\mathcal{H}_0$ beschriebene System koppelt (in linearer Näherung) an ein externes, transversales Strahlungsfeld $A_\mu^{ext}(\pm t)$ gemäß

$$\mathcal{H}_1(t) = -\int d^3\tau \, \tfrac{1}{c} j_\mu^T(\pm t) A_\mu^{ext}(\pm t) \tag{24.2}$$

an. Der Strom-Operator war schon definiert als

$$j_\mu(\pm) := \frac{e\hbar}{2mi}\sum_s \{\psi^+(\tau s)(\partial_\mu \psi(\tau s) - (\partial_\mu \psi^+(\tau s))\psi(\tau s)\} + c\,\varepsilon_{\mu\nu\rho}\partial_\nu\Big\{\mu_B \sum_{s,s'}\psi^+(\tau' s')(\sigma_\rho)_{s's}\psi(\tau s)\Big\}$$
$$- e^2/mc \sum_s \psi^+(\tau s)\psi(\tau s) A_\mu(\pm). \tag{24.3}$$

Jetzt ist der Mittelwert des internen Feldes $A_\mu(\pm)$ gegeben durch

$$\langle A(2)\rangle_{A^{ext}} = \rho_p \, e^{-\beta\mathcal{H}_0} T A(2) S(-i\hbar\beta)/\rho_p \, e^{-\beta\mathcal{H}_0} S(-i\hbar\beta) \tag{24.4}$$

$$S(-i\hbar\beta) = T\exp\left\{\tfrac{i}{\hbar}\tfrac{1}{c}\int_\Delta j^T(2) A^{ext}(2)\right\} \tag{24.5}$$

Es folgt der Respons des internen A-Feldes auf die Störung durch A^{ext}

$$\left(\frac{\delta\langle A(2)\rangle}{\delta A^{ext}(2')}\right)_{A^{ext}=0} = \frac{i}{\hbar}\left\{\langle TA(2)\tfrac{1}{c}\int j^T(2')\rangle - \langle A(2)\rangle\langle\tfrac{1}{c}\int j^T(2')\rangle\right\}_{A^{ext}=0} \tag{24.6}$$

Die rechte Seite ist aber nichts anderes als $\{\delta Q^T_{\frac{1}{2}0}(2')/\delta U_{\frac{1}{2}0}(2)\}_{U=0}$, so daß also folgt:

$$\left(\frac{\delta\langle A(2)\rangle}{\delta A^{ext}(2')}\right)_{A^{ext}=0} = Q^T_{10}(2'\underline{4})G^T_{10}(\underline{4}2) = G^T_{10}(2\underline{4})Q^T_{10}(\underline{4}2') \tag{24.7}$$

und zwar die rechte Seite an der Stelle U=0 genommen.

Bei der nun folgenden Herleitung der Stromkorrelationsfunktionen ist zu beachten, daß der oben angeschriebene Strom-Operator nicht ganz jener Strom-Operator ist, dessen Mittelwert auf der rechten Seite der inhomogenen Wellengl. steht. Diese lautet vielmehr

$$\vec{G}^{oT}_{10}(2\underline{2}')\langle A(2')\rangle = -\langle\tfrac{1}{c}\int^T_{int}(2)\rangle. \tag{24.8}$$

---

hier angeschriebenen kausalen in der üblichen Weise zusammen.

Dabei unterscheidet sich dieser physikalische Strom $j^T_{ind}(\pm p)$ von $j^T(\pm p)$ um den Term

$$-e^2/mc \sum_s \psi^+(\pm s)\psi(\pm s) A^{ext}(\pm p) \qquad (24.9)$$

entsprechend der Tatsache, daß $A^{ext}_r(\pm)$ auch direkt zum diamagnetischen Strom beiträgt.

Es folgt also (alle Variationsableitungen verstehen sich für $A^{ext}=0$):

$$\frac{\delta \langle 1/c\, j^T_{ind}(2)\rangle}{\delta A^{ext}(2')} = \frac{\delta \langle 1/c\, j^T(2)\rangle}{\delta A^{ext}(2')} - \delta^T(2,4)\left\{\frac{e}{mc^2}\langle \varrho(4)\rangle \delta(4,4')\right\}\delta^T(4',2')$$

$$= i/\hbar \langle T \frac{A}{c} j^T(2) 1/c\, j^T(2')\rangle - \delta^T(2,4)\left\{e/mc^2 \langle \varrho(4)\rangle \delta(4,4')\right\}\delta^T(4',2') \qquad (24.10)$$

Da aber andererseits gilt:

$$\frac{\delta \langle 1/c\, j^T_{ind}(2)\rangle}{\delta A^{ext}(2')} = -\tilde{G}^{oT}_{10}(2\,4)\frac{\delta \langle A(4)\rangle}{\delta A^{ext}(2')} = -\tilde{G}^{oT}_{10}(2\,4)\, G^T_{10}(4\,4')\, Q^T_{10}(4'2'), \qquad (24.11)$$

folgt das Ergebnis:

$$\boxed{-1/c^2\,\delta^T(2,4)\left\{i/\hbar \langle T j(4) j(4')\rangle - e/m \langle \varrho(4)\rangle \delta(4,4')\right\}\delta^T(4',2') = \tilde{G}^{oT}_{10}(2\,4)\, G^T_{10}(4\,4')\, Q^T_{10}(4'2')} \qquad (24.12)$$

Verwendung der Bewegungsgl. für G^T_{10} führt noch auf die Formen*)

$$-1/c^2\,\delta^T(2,4)\left\{i/\hbar \langle T j(4) j(4')\rangle - e/m \langle \varrho(4)\rangle \delta(4,4')\right\}\delta^T(4',2') = -\tilde{G}^{oT}_{10}(2\,2') + \tilde{G}^{oT}_{10}(2\,4)\, G^T_{10}(4\,4')\, \tilde{G}^{oT}_{10}(4'2')$$

$$= Q^T_{10}(2\,2') + Q^T_{10}(2\,4)\, G^T_{10}(4\,4')\, Q^T_{10}(4'2')$$

Die linke Seite wird in dieser Kombination geschlossen gebraucht zur Bestimmung der RTK gemäß den oben aufgestellten Formeln; daher ist es angebracht, für sie eine Abkürzung zu verwenden:

$$Q^T_{10}(2\,2')^* := \delta^T(2,4)\, Q_{10}(4\,4')^* \delta^T(4',2')$$

$$Q_{10}(4\,4')^* := -1/c^2\left\{i/\hbar \langle T j(4) j(4')\rangle - e/m \langle \varrho(4)\rangle \delta(4,4')\right\}. \qquad (24.13)$$

---

*) für den homogenen u. isotropen Raum:

$$\chi^T_{ij}(qz) - \omega^2_p = z^2 - c^2q^2 + (z^2 - c^2q^2)\,1/c^2\,\chi_{AA}(qz)/(z^2 - c^2q^2)$$

Mit dieser Abkürzung schreibt sich obige Gl.

$$Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')^{*} = Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}') + Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{4})\, G^{T}_{10}(\underline{4}\underline{4}')\, Q^{T}_{10}(\underline{4}'\underline{2}') \tag{24.14}$$

oder durch abermalige Verwendung der Bewegungsgl. von G^{T}_{10} :

$$\boxed{\begin{aligned} Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')^{*} &= Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}') + Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{4})\, G^{oT}_{10}(\underline{4}\underline{4}')\, Q^{T}_{10}(\underline{4}'\underline{2}')^{*} \\ &= Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}') + Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{4})^{*}\, G^{oT}_{10}(\underline{4}\underline{4}')\, Q^{T}_{10}(\underline{4}'\underline{2}') \end{aligned}} \tag{24.15}$$

Diese Gl. ist offensichtlich das genaue Analogon zu der bekannten Gl.

$$-\chi_{ss}(22') = -\chi^{o}_{ss}(22') + \chi^{o}_{ss}(24)\, V(44')\, \chi_{ss}(4'2')\,,$$

die die Verknüpfung der Dichte-Dichte-Funktion χ_{ss} mit der irreduziblen Polarisationsfunktion χ^{o}_{ss} vermittels der skalaren Wechselwirkung V herstellt.

Damit ist ein durchsichtiges Verfahren zur Bestimmung der RTK gewonnen:

1) Aus der oben formelhaft erfaßten Dynamik des Systems braucht man explizit nur (eine Näherung für) Q^{T}_{10} .
2) Vermittels der gerade angegebenen Gl. bestimmt sich daraus Q^{T*}_{10}.
3) Spezifikation der Argumente in Q^{T*}_{10} liefert unmittelbar die gesuchten RTK.

25. Das Entkopplungsverfahren

Das oben aufgestellte Gleichungssystem kann z.B. schrittweise in immer höheren Potenzen von e/c gelöst werden*):

1. Im Limes $c \to \infty$ entarten die acht Gln. zu

1) $G^{(0)}_{02}(\lambda 3, \lambda' 3') = - G^{(0)}_{01}(\lambda,3')\, G^{(0)}_{01}(3,\lambda') + G^{(0)}_{01}(\lambda,\bar\lambda')\, G^{(0)}_{01}(\bar\lambda,\lambda')\, Q^{(0)}_{02}(\lambda' 3', \bar\lambda\bar 3)\, G^{(0)}_{02}(\bar 3 3, \bar 3' 3')$

2) $Q^{(0)T}_{\frac{1}{2}0}(2) = 0$

3) $Q^{(0)}_{10}(2\,2') = 0$

4) $Q^{(0)}_{01}(\lambda',\lambda) = N(2,\lambda'\lambda) V(22') N(2',33') \tfrac{\hbar}{i} G^{(0)}_{01}(3,3') - N(2,\lambda' 3) V(22') N(2',3'\lambda) \tfrac{\hbar}{i} G^{(0)}_{01}(3,3')$
$+ N(2,\lambda' 3) V(22') N(2,55') G^{(0)}_{02}(75,7'5')\, Q^{(0)}_{02}(3'7', \lambda 7) \tfrac{\hbar}{i} G^{(0)}_{01}(3,3')$

(25.1a-h)

5) $Q^{(0)T}_{\frac{1}{2}1}(2;\lambda',\lambda) = 0$

6) $Q^{(0)T}_{11}(2\,2';\lambda',\lambda) = 0$

7) $Q^{(0)}_{02}(\lambda' 3', \lambda 3) = \delta Q_{01}(\lambda',\lambda)/\delta G_{01}(3,3')$

8) $Q^{(0)T}_{\frac{3}{2}0}(2\,4\,6) = 0$

entsprechend der elektrostatischen Theorie des Coulombisch wechselwirkenden Elektronengases. Die Integrabilitätsbedingungen (23.14) sind trivial erfüllt.

---

*) Die unabhängigen Variablen $G^{T}_{\frac{1}{2}0}$, G^{T}_{10} , G_{01} sollen (trotz Indizierung der gerade betrachteten Ordnung an ihnen) nicht ebenfalls nach e/c entwickelt gedacht werden. Hier, wo es z.B. um die Lage der Pole geht, soll (im Sinne "partieller Summation") die volle e/c-Abhängigkeit mitgenommen werden.

Da hier die transversalen Effekte interessieren und nicht die durch die Coulomb-Wechselwirkung vermittelte Korrelation zwischen den Elektronen, sollen Beiträge zu $Q^{(o)}_{o\lambda}(1;1)$ entsprechend dem dritten Graphen in Zukunft vernachlässigt werden.*) Es folgt für die Wechselwirkung $Q^{(o)}_{o2}(1'3',13)$:

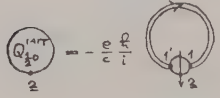
$$Q^{(o)}_{o2}(\lambda'3',\lambda 3) = \mathcal{N}(2,\lambda'\lambda)\tfrac{\hbar}{i}V(22')\mathcal{N}(2',33') - \mathcal{N}(2,\lambda'3)\tfrac{\hbar}{i}V(22')\mathcal{N}(2',3'\lambda)$$

(25.1g')

2. Berücksichtigt man Terme linear in e/c, so lauten die 8 Gln.

1) $G^{(1)}_{o2}(\lambda 3,\lambda'3') = -G^{(o)}_{o\lambda}(\lambda,3')G^{(o)}_{o\lambda}(3,\lambda') + G^{(o)}_{o\lambda}(\lambda,\bar\lambda')G^{(1)}_{o\lambda}(\bar\lambda,\lambda')Q^{(o)}_{o2}(\lambda'\bar 3',\bar\lambda\bar 3)G^{(o)}_{o2}(\bar 3 3,\bar 3'3')$

2) $Q^{(1)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) = -\delta^T(2,2')\tfrac{e}{c}\mathcal{T}_{ind.}(2',\lambda'\lambda)\tfrac{\hbar}{i}G^{(o)}_{o\lambda}(\lambda,\lambda')$ (25.2a-h)



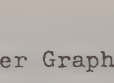
also: $\delta Q^{(1)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})/\delta G^{(o)}_{o\lambda}(\lambda,\lambda') = -\delta^T(2,2')\tfrac{e}{c}\mathcal{T}_{ind.}(2',\lambda'\lambda)\tfrac{\hbar}{i}$

Die anderen Ableitungen verschwinden.

3) $Q^{(1)T}_{oo}(\underline{2}\underline{2}') = 0$

4) $Q^{(1)}_{o\lambda}(\lambda'\lambda) = \mathcal{N}(2,\lambda'\lambda)\tfrac{\hbar}{i}V(22')\mathcal{N}(2',33')G^{(1)}_{o\lambda}(3,3') - \mathcal{N}(2,\lambda'3)\tfrac{\hbar}{i}V(22')\mathcal{N}(2',3'\lambda)G^{(1)}_{o\lambda}(3,3')$

$$-\tfrac{e}{c}\mathcal{T}_{ind.}(2;\lambda'\lambda)G^{(o)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})$$

Es kommt also nur folgender Graph hinzu: 

---

*) Weiter unten soll aus praktischen Gründen auch noch der Austausch-Term vernachlässigt werden. Bis zu dieser Stelle könnte man ohne Probleme die Beiträge des dritten Graphen in $Q_{o\lambda}$ insoweit mitnehmen, als sie die nackte Austausch-Wechselwirkung durch eine effektive ersetzen. Es ändern

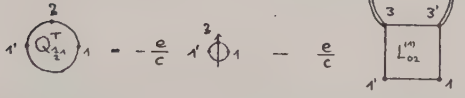
Die Ableitungen sind

$$\delta Q^{(s)}_{01}(1',1)/\delta G^{(s)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) = -\delta^T(\underline{2},\underline{2}')\,e/c\,\mathcal{T}_{ind}(\underline{2}',1',1)$$

$$\delta Q^{(s)}_{01}(1,1)/\delta G^{(s)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}\,\underline{2}') = 0$$

$$\delta Q^{(s)}_{01}(1',1)/\delta G^{(s)}_{01}(3,3') = \mathcal{N}(2,1'1)\,\tfrac{1}{2}V(22')\,\mathcal{N}(2',33') - \mathcal{N}(2,1'3')\,\tfrac{1}{2}V(22')\,\mathcal{N}(2',3'1)$$

5) $$Q^{(s)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1'1) = \delta^T(\underline{2},\underline{2}')\{-e/c\,\mathcal{T}_{ind}(\underline{2}';1'1) - L^{(s)}_{02}(1'1,3'3)\,G_{01}(3,5')\,G_{01}(5,3')\,e/c\,\mathcal{T}_{ind}(\underline{2}';5'5)\}$$



Dabei ist - siehe weiter unten -

$$L^{(s)}_{02}(1'1,3'3) = Q^{(s)}_{02}(1'3',13)$$

6) $$Q^{(s)T}_{11}(\underline{2}\,\underline{2}';1',1) = 0$$

7) $$Q^{(s)}_{02}(1'3',13) = \mathcal{N}(2,1'1)\,\tfrac{1}{2}V(22')\,\mathcal{N}(2',3'3) - \mathcal{N}(2,1'3')\,\tfrac{1}{2}V(2,2')\,\mathcal{N}(2',3'1)$$

Man hat also dieselben Graphen wie unter 1.

8) $$Q^{(s)T}_{\frac{3}{2}0}(\underline{2}\,\underline{4}\,\underline{6}) = 0$$

In der Tat ist

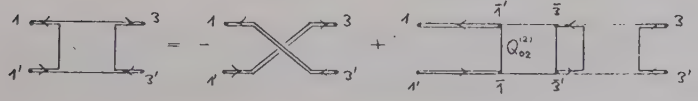
$$\frac{i}{\hbar}\,\frac{\delta Q^{(s)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G_{01}(1,1')} = -\delta^T(\underline{2},\underline{2}')\,\frac{e}{c}\,\mathcal{T}_{ind}(\underline{2}';1'1) = \frac{\delta Q^{(s)}_{01}(1',1)}{\delta G^{(s)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}\;;$$

die anderen beiden Integrabilitätsbedingungen gelten trivial.

3. Berücksichtigt man noch Terme quadratisch in e/c, so hat man die 8 Gln.:

1) $$\underline{G^{(2)}_{02}(13,1'3')} = -G^{(2)}_{01}(1,3')\,G^{(2)}_{01}(3,1') + G^{(2)}_{01}(1,\bar{1}')\,G^{(2)}_{01}(\bar{1},1')\,Q^{(2)}_{02}(\bar{1}'\bar{3}',\bar{1}\bar{3})\,G^{(2)}_{02}(\bar{3}3,\bar{3}'3')$$

(25.3a)

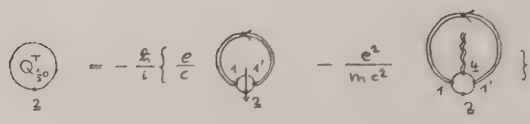


---

sich i.w. nur die irreduziblen Wechselwirkungen Q_{02} u. L_{02}.

2) $Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) = -\delta^T(\underline{2},\underline{4})\{e/i\,\Gamma_{ind.}(\underline{4},\lambda'\lambda)\,\hbar/i\,G^{(2)}_{0\lambda}(\lambda,\lambda') - e^2/mc^2\,Q(\underline{4}\,\underline{4}';\lambda'\lambda)\,G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{4}')\,\hbar/i\,G^{(2)}_{0\lambda}(\lambda,\lambda')\}$

(25.3b)



Die Ableitungen sind:

$$\frac{\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}')} = \delta^T(\underline{2},\underline{4})\,\delta^T(\underline{2}',\underline{4}')\,\frac{e^2}{mc^2}\,Q(\underline{4}\,\underline{4}';\lambda'\lambda)\,\frac{\hbar}{i}\,G^{(2)}_{0\lambda}(\lambda,\lambda')$$

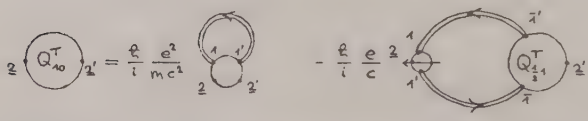
$$\frac{\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{(2)T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')} = 0$$

$$\frac{\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{(2)}_{0\lambda}(\lambda,\lambda')} = -\delta^T(\underline{2},\underline{4})\left\{\frac{e}{c}\,\Gamma_{ind.}(4,\lambda'\lambda) - \frac{e^2}{mc^2}\,Q(\underline{4}\,\underline{4}',\lambda'\lambda)\,G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{4}')\right\}\frac{\hbar}{i}$$

3) $Q^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') = \delta^T(\underline{2},\underline{4})\,\delta^T(\underline{2}',\underline{4}')\,e^2/mc^2\,Q(\underline{4}\,\underline{4}';\lambda'\lambda)\,\hbar/i\,G^{(2)}_{0\lambda}(\lambda,\lambda')$

$-\delta^T(\underline{2},\underline{4})\,e/c\,\Gamma_{ind.}(4,\lambda'\lambda)\,\hbar/i\,G^{(2)}_{0\lambda}(\lambda,\bar{\lambda}')\,G^{(2)}_{0\lambda}(\bar{\lambda},\lambda')\,Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}\lambda}(\underline{2}';\bar{\lambda}\bar{\lambda})$

(25.3c)

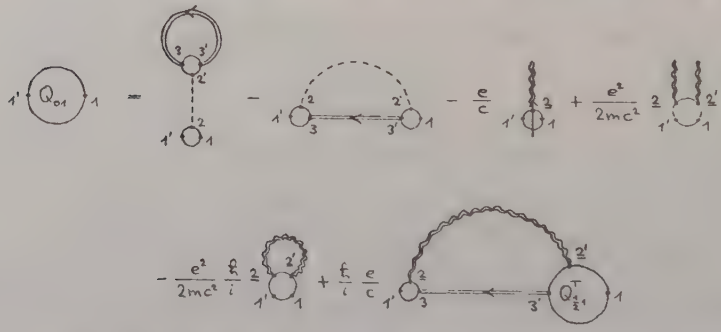


4) $Q^{(2)}_{0\lambda}(\lambda',\lambda) = N(2,\lambda'\lambda)\,\hbar/i\,V(2\,2')\,N(2',3\,3')\,G^{(2)}_{0\lambda}(3,3') - N(2,\lambda'3)\,\hbar/i\,V(2\,2')\,N(2',3'\lambda)\,G^{(2)}_{0\lambda}(3,3')$

$-e/c\,\Gamma_{ind.}(2,\lambda'\lambda)\,G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}) + e^2/2mc^2\,Q(\underline{2}\,\underline{2}';\lambda'\lambda)\,G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})\,G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})$

$-e^2/2mc^2\,Q(\underline{2}\,\underline{2}';\lambda'\lambda)\,\hbar/i\,G^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}') + e/c\,\Gamma_{ind.}(2,\lambda'3)\,\hbar/i\,G^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\,Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}\lambda}(\underline{2}';3'\lambda)\,G^{(2)}_{0\lambda}(3,3')$

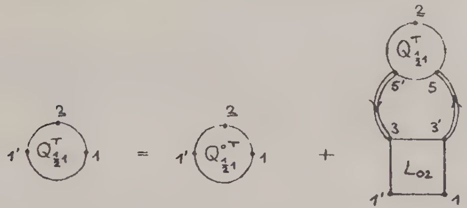
(25.3d)



Den letzten Graphen denke man sich symmetrisiert bez. der Lagen des nackten und des angezogenen Vertex.

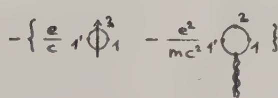
5) $Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1'1) = Q^{(02)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1'1) + L^{(2)}_{02}(1'1,3'3)\, G^{(2)}_{01}(3,5')\, G^{(2)}_{01}(5,3')\, Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};5'5)$ *)

(25.3e)



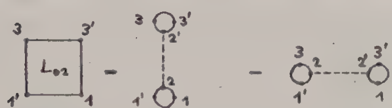
Dabei ist

$$Q^{(02)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1'1) = -\delta^T(\underline{2},\underline{4})\left\{ e/c\, J_{nd}(\underline{4};1'1) - e^2/mc^2\, \mathcal{Q}(\underline{4}\,\underline{2}';1'1)\, G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2}')\right\}$$



und

$$L^{(2)}_{02}(1'1,3'3) = \mathcal{N}(2,1'1)\,\hbar/i\, V(2,2')\,\mathcal{N}(2',33') - \mathcal{N}(2,1'3)\,\hbar/i\, V(22')\,\mathcal{N}(2',13')$$

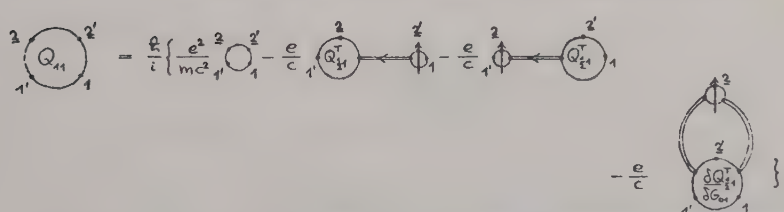


6) $Q^{(2)T}_{11}(\underline{2}\,\underline{2}';1'1) = \delta^T(\underline{2},\underline{4})\,\delta^T(\underline{2}',\underline{4}')\, e^2/mc^2 \cdot \hbar/i\, \mathcal{Q}(\underline{4}\,\underline{4}';1'1)$

$$-\delta^T(\underline{2},\underline{4})\left\{ e/c\, J_{nd}(\underline{4},3'1)\,\hbar/i\, G_{01}(3,3')\, Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';1'3) \right.$$

$$\left. + e/c\, J_{nd}(\underline{4},1'3)\,\hbar/i\, G_{01}(3,3')\, Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';3'1)\right\} \qquad (25.3f)$$

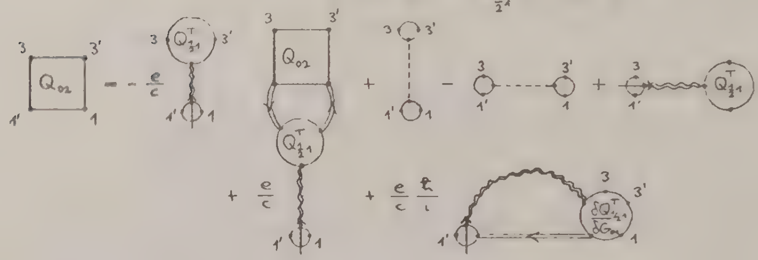
$$-\delta^T(\underline{2},\underline{4})\, e/c\, J_{nd}(\underline{4},3'3)\,\hbar/i\, G^{(2)}_{01}(3,5')\, G^{(2)}_{01}(5,3')\, \delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';5'5)/\delta G^{(2)}_{01}(1,1')$$ **)



*) Der Summand $\propto \delta Q_{01}/\delta G^T_{10}$ trägt in dieser Ordnung nichts bei; ebenfalls braucht bei der Ableitung $\delta Q_{01}/\delta G_{01}$ in Q_{01} der letzte Term nicht mehr berücksichtigt zu werden.

**) Nur der Term $\delta Q^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')/\delta G^{(2)}_{01}(1,1')$ trägt in dieser Ordnung bei.

$$7)\ Q^{(2)}_{02}(1'3',13) = \tfrac{e}{c}\,\mathcal{J}_{ind}(\underline{2},1'1)\tfrac{\hbar}{i}\,G^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\,Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';3'3)$$
$$+\tfrac{e}{c}\,\mathcal{J}_{ind.}(\underline{2},1'1)\tfrac{\hbar}{i}\,G^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\,Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';5'5)\,G^{(2)}_{01}(5,7')\,G^{(2)}_{01}(7,5')\,Q_{02}(7'3',73)$$
$$+\mathcal{N}(2,1'1)\tfrac{\hbar}{i}V(22')\mathcal{N}(2',33')-\mathcal{N}(2,1'3)\tfrac{\hbar}{i}V(22')\mathcal{N}(2',13')+\tfrac{e}{c}\,\mathcal{J}_{ind}(\underline{2},1'3)\tfrac{\hbar}{i}\,G^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\,Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';3'1)$$
$$+\tfrac{e}{c}\,\mathcal{J}_{ind.}(\underline{2},1'5)\tfrac{\hbar}{i}\,G^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')\,G^{(2)}_{01}(5,5')\,\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2}';5'1)/\delta G^{(2)}_{01}(3,3')\ ^{*)}$$



(25.3g)

$$8)\ Q^{(2)T}_{\frac{3}{2}0}(\underline{2}\,\underline{4}\,\underline{6}) = 0 \qquad (25.3h)$$

Die Integrabilitätsbedingungen

$$\frac{i}{\hbar}\,\frac{\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{(2)}_{01}(1,1')} = -\delta^T(\underline{2}\,\underline{4})\Big\{\frac{e}{c}\mathcal{J}_{ind.}(\underline{4},1'1)-\frac{e^2}{mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{4}\,\underline{4}',1'1)\,G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(4')\Big\} = \frac{\delta Q^{(2)}_{01}(1',1)}{\delta G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}$$

$$-\frac{i}{\hbar}\,\frac{\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}{\delta G^{(2)T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')} = 0 = \frac{1}{2}\,\frac{\delta Q^{(2)T}_{10}(\underline{4}\,\underline{4}')}{\delta G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})}$$

$$\frac{\delta Q^{(2)}_{01}(1',1)}{\delta G^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')} = -\delta^T(2,4)\,\delta^T(2',4')\,\frac{\hbar}{i}\Big\{\frac{e^2}{2mc^2}\,\mathcal{Q}(\underline{4}\,\underline{4}';1'1)-\frac{e}{2c}\Big(\mathcal{J}_{ind.}(\underline{4};1'3)\,G^{(2)}_{01}(3,3')\,Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{4}';3'1)$$
$$+\,Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{4}';1'3)\,G^{(2)}_{01}(3,3')\,\mathcal{J}_{ind.}(4;3'1)\Big)\Big\}$$

$$\neq -\frac{1}{2}\,\frac{\delta Q^{(2)T}_{10}(\underline{2}\,\underline{2}')}{\delta G^{(2)}_{01}(1,1')}$$

---

*) Der Term $\propto \delta Q_{01}/\delta G^T_{10}$ trägt in dieser Ordnung nichts bei. Offensichtlich träte die Symmetrie zwischen skalarer und transversaler Wechselwirkung noch klarer hervor, wenn man in $Q^{(2)}_{01}$ statt des nackten einen effektiven Austausch gewählt hätte (cf.p.88 Fußnote). Bez. der Symmetrie der direkten Wechselwirkungen cf. weiter unten!

sind (in 2. Ordnung bez. e/c) erfüllt - bis auf die dritte, die genauer betrachtet werden muß. Es ist nämlich

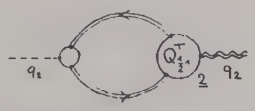
$$-\frac{1}{2}\frac{\delta Q^{(2)T}_{\alpha\alpha}(2\underline{2}')}{\delta G^{(2)}_{\alpha\alpha}(1,1')} = -\int^{T}(2\underline{4})\delta^{T}(2'\underline{4}')\frac{\hbar}{i}\Big\{\frac{e^2}{2mc^2}Q(4\underline{4}';1'1)-\frac{e}{2c}\Big(\gamma_{md}(\underline{4};1'3)G^{(2)}_{\alpha\alpha}(3,3')Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{4}';3'1)+Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{4}';1'3)G^{(2)}_{\alpha\alpha}(3,3')\gamma_{md}(\underline{4};3'1)\Big)$$

$$-\frac{e}{2c}\gamma_{md}(\underline{4};3'3)G^{(2)}_{\alpha\alpha}(3,5')G^{(2)}_{\alpha\alpha}(5,3')\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{4}';5'5)/\delta G^{(2)}_{\alpha\alpha}(1,1')\Big\}$$

um den dritten Term, der die Ableitung $\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}/\delta G^{(2)}_{\alpha\alpha}(1,1')$ enthält, verschieden von $\delta Q^{(2)}_{\alpha\alpha}(1,1)/\delta G^{(2)T}_{\mu\mu}(2\underline{2}')$. Das ist aber nicht verwunderlich. Denn entsprechende Beiträge zu $Q^{(2)}_{\alpha\alpha}(1',1)$, deren Ableitung nach $G^{(2)}_{\alpha\alpha}(1,1')$ den vermißten Term liefern würde, sind als höhere Korrelationseffekte vernachlässigt worden. Daher soll auch hier, sowie in den obigen Näherungen $Q^{(2)T}_{\mu\mu}(2\underline{2}',1'1)$ und $Q^{(2)}_{\alpha\alpha}(1'3',13)$ ein Beitrag von $\delta Q^{T}_{\frac{1}{2}1}/\delta G_{\alpha\alpha}$ als "höhere Korrelation" vernachlässigt werden. In diesem Sinn kann man die Integrabilitätsbedingungen als erfüllt ansehen.

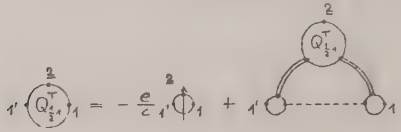
Der Vertex $Q^{T}_{\frac{1}{2}1}$

Der Vertex $Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2},1'1)$ ist offenbar die zentrale Größe. Speziell im Fall des homogenen und isotropen Raumes (d.h. insbesondere auch U=0 $\Rightarrow G^{T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{2})=0$) läßt sich obige Gl. für $Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}$ wesentlich vereinfachen: Ein Diagramm



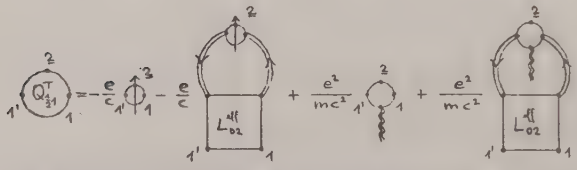
kann nun keinen nicht-verschwindenden Beitrag mehr leisten. Denn dieser Vektor hängt nur vom Impulsübertrag q_2 ab. Er muß also einerseits parallel zu q_2 sein, da dies die einzige ausgezeichnete Richtung im Raum ist; andererseits muß er senkrecht auf q_2 stehen, da $Q^{T}_{\frac{1}{2}1}$ als transversal eingeführt

worden ist. Daher zieht im homogenen und isotropen Raum nur die Austausch-Wechselwirkung den Vertex $Q^{(02)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2},1'1) = -e/c \cdot \mathcal{J}_{nd.}(\underline{2},1'1)$ an gemäß der Gl.



Im allgemeinen läßt sich die Gl. (25.3e) "lösen" durch

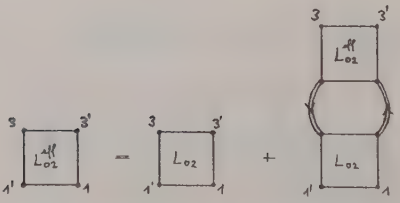
$$Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}(\underline{2};1'\lambda) = -\delta^T(\underline{2},\underline{4})\{\%\,\mathcal{J}_{nd.}(\underline{4},1'\lambda) - L^{eff}_{02}(\lambda'\lambda,3'3)G^{(2)}_{01}(3,5')G^{(2)}_{01}(5,3')\%\,\mathcal{J}_{nd.}(\underline{4},5'5)$$
$$-e^2/mc^2\,Q(\underline{4}\,\underline{4}',1'\lambda)G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{4}') + L^{eff}_{02}(\lambda'\lambda,3'3)G^{(2)}_{01}(3,5')G^{(2)}_{01}(5,3')e^2/mc^2\,Q(\underline{4}\,\underline{4}',5'5)G^{(2)T}_{\frac{1}{2}0}(\underline{4}')\}$$



(25.4)

mit der effektiven Wechselwirkung $L^{eff}_{02}(1'1,3'3)$ definiert durch

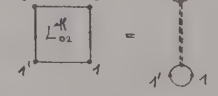
$$L^{eff}_{02}(\lambda'\lambda,3'3) = L^{(2)}_{02}(\lambda'\lambda,3'3) + L^{(2)}_{02}(\lambda'\lambda,5'5)G^{(2)}_{01}(5,7')G^{(2)}_{01}(7,5')L^{eff}_{02}(7'7,3'3)$$



(25.5)

Vernachlässigt man die Austausch-Wechselwirkung in $L^{(2)}_{01}$ so ist einfach

$$L^{eff}_{02}(\lambda'\lambda,3'3) = \mathcal{N}(2,\lambda'\lambda)^{\dagger}\,V_{eff}(22')\,\mathcal{N}(2,3'3)$$

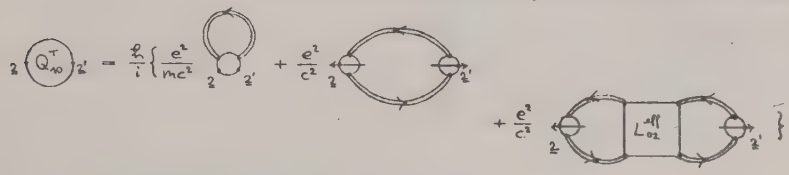


(25.6)

Die Photon-Selbstenergie $Q^{T}_{\mu\nu}$

Mit Hilfe des Vertex $Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}$, wie er z.B. durch Gl. (25.4) gegeben ist, ergibt sich (in 2. Ordnung bez. e/c):

$$Q^{(2)T}_{\mu\nu}(\underline{2},\underline{2}') = \delta^{T}(\underline{2},\underline{4})\delta^{T}(\underline{2}',\underline{4}')\tfrac{\hbar}{i}\{\tfrac{e^2}{mc^2}\mathcal{Q}(\underline{4}\underline{4}',11')G^{(2)}_{\alpha\alpha}(1,1') + e^2/c^2\,\mathcal{T}_{ind.}(\underline{4},1'1)G^{(2)}_{\alpha\lambda}(1,3')G^{(2)}_{\alpha\lambda}(3,1')\mathcal{T}_{ind.}(\underline{4}',3'3)$$
$$+ e^2/c^2\,\mathcal{T}_{ind.}(\underline{4},1'1)G^{(2)}_{\alpha\lambda}(1,3')G^{(2)}_{\alpha\lambda}(3,1')L^{eff}_{\alpha 2}(3'3,5'5)G^{(2)}_{\alpha\lambda}(5,7')G^{(2)}_{\alpha\lambda}(7,5')\mathcal{T}_{ind.}(\underline{4}',7'7)\}$$



(25.7)

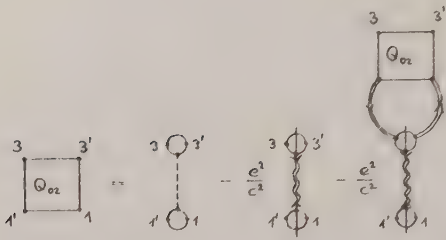
Wie oben diskutiert, entfällt für den homogenen und isotropen Raum der dritte Graph völlig, wenn man die Austausch-Wechselwirkung vernachlässigt (Hartree-Näherung; RPA).
Die schon früher (p.86) bemerkte Analogie zwischen $Q^{T}_{\mu\nu}$ und der irreduziblen Polarisationsfunktion $-\chi^{0}_{\varrho\varrho}$ tritt in diesem Fall besonders klar hervor: Abgesehen von dem zusätzlichen diamagnetischen Term, dem 1. Graphen, unterscheiden sich die jeweiligen "RPA-Blasen" nur durch ihre nackten Vertices $\frac{1}{c}\mathcal{T}_{ind.}$ bzw. $\mathcal{N}$, mit denen sie an die transversale "Wechselwirkung" $\frac{\hbar}{i}G^{T}_{\mu\nu}$ bzw. die skalare Wechselwirkung $\frac{\hbar}{i}V$ ankoppeln.

Die Wechselwirkung $Q^{(2)}_{\alpha 2}$

$Q^{(2)}_{\alpha 2}(1'3',13)$, wie man es aus Gl. (25.3g) durch Vernachlässigung von $\delta Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}/\delta G_{\alpha\lambda}$ und Einsetzen von Gl. (25.4) für $Q^{(2)T}_{\frac{1}{2}1}$ erhält, gewinnt nur für das homogene und isotrope Medium und nur in RPA eine solche einfache Gestalt, daß skalare und transversale Wechselwirkung der Elektronen von einander getrennt erscheinen. In diesem Fall läßt sich

$$Q_{02}^{(2)}(1'3',13) = +\tfrac{e}{c}\,J_{nd}(\underline{2},1'1)\,\tfrac{\hbar}{i}\,G_{10}^{(2)T}(\underline{2}\,\underline{2}')\,\tfrac{e}{c}\,J_{nd}(\underline{2}',3'3)$$
$$-\tfrac{e}{c}\,J_{nd}(\underline{2},1'1)\,\tfrac{\hbar}{i}\,G_{10}^{(2)T}(\underline{2}\,\underline{2}')\,\tfrac{e}{c}\,J_{nd}(\underline{2}',5'5)\,G_{01}^{(2)}(5,7')\,G_{01}^{(2)}(7,5')\,Q_{02}^{(2)}(7'3',73)$$
$$+N(2,1'1)\,\tfrac{\hbar}{i}\,V(22')\,N(2',3'3)$$

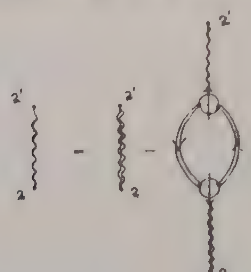
(25.8)



leicht nach Q_{02} auflösen. Denn iteriert man diese Gl. nach der Inhomogenität, verschwinden wieder alle Beiträge, die die skalare Wechselwirkung enthalten. Im Ergebnis wird man auf eine "Re-Renormalisierung" der Photon-Linie geführt gemäß der Gl.

$$\hat{G}_{10}^{0T}(\underline{2}\,\underline{2}') = G_{10}^{(2)T}(\underline{2}\,\underline{2}') - G_{10}^{(2)T}(\underline{2}\,\underline{4})\,\tfrac{e}{c}\,J_{nd}(\underline{4},1'1)\,G_{01}^{(2)}(1,3')\,G_{01}^{(2)}(3,1')\,\tfrac{e}{c}\,J_{nd}(\underline{4}',3'3)\,\hat{G}_{10}^{0T}(\underline{4}'\,\underline{2}')$$

(25.9)



Offensichtlich macht diese "Re-Renormalisierung" den Effekt der (RPA-)Blase in $Q_{10}^{(2)T}$ bei der Renormalisierung von $G_{10}^{0T}(\underline{2}\,\underline{2}')$ zu $G_{10}^{(2)T}(\underline{2}\,\underline{2}')$ wieder rückgängig. Es folgt die Fourier-Transformierte*):

$$1/c^2\,\hat{G}_{10}^{0T}(\mu\nu;q z) = \delta_{\mu\nu}^{T}(q)\cdot 1/(z^2 - c^2q^2 - \omega_p^2) \qquad (25.10)$$

mit der Plasma-Frequenz ω_p des Mediums

$$\omega_p^2 := e^2/m\;\hbar/i\;G_{01}(1,1^+) \equiv ne^2/m \qquad (25.11)$$

---

*) Definition: $G_{10}^{T}(r\mu t, r'\mu' t') = (1/\Omega)(-1/i\hbar\beta)\sum_{q z_n} G_{10}^{T}(\mu\mu'; q z_n)\, e^{iq(r-r') - i z_n(t-t')}$ u.ä.

N.B. Der Übergang von der nackten Photon-Funktion

$$1/c^2\, G^{0T}_{\mu\nu}(\mu\nu;qz) = \delta^T_{\mu\nu}(q)\cdot 1/(z^2 - c^2q^2)$$

zu der "fast nackten" Photon-Funktion des Mediums

$$1/c^2\, \hat{G}^{0T}_{\mu\nu}(\mu\nu;qz) = \delta^T_{\mu\nu}(q)\cdot 1/(z^2 - c^2q^2 - \omega_p^2)$$

ist mit einem Blick auf den Hamilton-Operator (19.2) oder (19.7) leicht zu verstehen. Die drei letzten Terme, nämlich der diamagnetische Kopplungsterm und die beiden Terme der Energie des Strahlungsfeldes, schreiben sich in Fourier-Darstellung

$$1/2\Omega^2 \sum_{qq'} e/mc^2\, \varrho(q-q')\, A(q\mu)^+ A(q'\mu)$$
$$+ 1/2\Omega \sum_q \{E^T(q\mu)^+ E^T(q\mu) + q^2 A(q\mu)^+ A(q\mu)\}$$

oder, da $e/m\, \varrho(q=0)/\Omega = \omega_p^2$ eine c-Zahl ist, auch

$$1/2\Omega^2 \sum_{q+q'} e/mc^2\, \varrho(q-q')\, A(q\mu)^+ A(q'\mu)$$
$$+ 1/2\Omega \sum_q \{E^T(q\mu)^+ E^T(q\mu) + (q^2 + \omega_p^2/c^2) A(q\mu)^+ A(q\mu)\}.$$

$\hat{G}^{0T}_{\mu\nu}(\underline{2}\underline{2}')$ ist offenbar die (nackte) Green-Funktion eines Strahlungsfeldes, das in dieser Weise den globalen Effekt des Mediums schon inkorporiert hat.

Es folgt also für die Elektronen-Wechselwirkung Q_{02} in RPA:

$$Q^{(2)}_{02}(1'3',13) = \mathcal{N}(2,1'1)\, i\hbar\, V(2,2')\, \mathcal{N}(2',3'3) + e/c\, \mathcal{T}_{md}(2,1'1)\, i\hbar\, \hat{G}^{0T}_{\mu\nu}(2\underline{2}')\, e/c\, \mathcal{T}_{md}(\underline{2}',3'3) \qquad (25.11)$$

Fourier-Transformation gemäß

$$Q^{(2)}_{02}(q_1+q\,z_1+z\,s'_1, q_3-q'\,z_3-z\,s'_3; q_1 z_1 s_1, q_3 z_3 s_3)$$
$$:= \int_0^{\frac{1}{kT}+\beta} dt'_1 dt'_3 dt_1 dt_3 \int d^3r'_1 d^3r'_3 d^3r_3\, e^{-i[(q_1+q)r'_1 - (z_1+z)t'_1]} e^{-i[(q_3-q')r'_3 - (z_3-z')t'_3]}$$
$$e^{i[q_1 r_1 - z_1 t_1]} e^{i[q_3 r_3 - z_3 t_3]}\, Q^{(2)}_{02}(1'3',13) \quad *)$$

---

*) z_1, z_3 Fermi-Frequenzen, z, z' Bose-Frequenzen.

führt auf

$$Q_{02}^{(12)}(q_1+qz_1+zs'_1,q_3-q'z_3-z's'_3;q_1z_1s_1,q_3z_3s_3)$$
$$=(-i\hbar\beta)\delta_{z,z'}\,Q\,\delta_{q,q'}\,\hbar/i\{-v^S(q_1;s_1s'_3,s_1s_3)+v^T(qz,q_1q_3;s'_1s'_3,s_1s_3)\} \qquad (25.12)$$

mit dem ("skalaren") Coulomb-Potential $v^S(q) := e^2/q^2\,\delta_{s'_1s_1}\delta_{s'_3s_3}$

("transversalen") retardierten, impuls- und spinabhängigen

Biot-Savart-Potential

$$v^T(qz,q_1q_3;s_1s'_3,s_1s_3)=\left\{\frac{e}{c}\,\frac{\hbar(q_1+q/2)^{(\mu)}}{m}\,\delta_{s'_1s_1}-i\varepsilon_{\mu\varrho\nu}q^{(\nu)}(\sigma_\varrho)_{s'_1s_1}\right\}D^T_{\mu\mu'}(q)\,\frac{c^2}{z^2-c^2q^2-\omega_p^2}\left\{\frac{e}{c}\,\frac{\hbar(q_3-q/2)^{(\mu')}}{m}\,\delta_{s'_3s_3}+i\varepsilon_{\mu'\nu'\varrho'}q^{(\nu')}(\sigma_{\varrho'})_{s'_3s_3}\right\}$$

$$=\frac{e^2}{q^2}\,\delta_{s'_1s_1}\delta_{s'_3s_3}+\frac{e^2}{z^2-c^2q^2-\omega_p^2}\,D^T_{\mu\nu}(q)\,\frac{\hbar q_1^{(\mu)}}{m}\,\frac{\hbar q_3^{(\nu)}}{m}\,\delta_{s'_1s_1}\delta_{s'_3s_3}$$

$$+2i\,\frac{c^2\mu_0^2}{z^2-c^2q^2-\omega_p^2}\cdot\left\{\varepsilon_{\varrho\mu\nu}q_1^{(\mu)}q^{(\nu)}\delta_{s'_1s_1}(\sigma_\varrho)_{s'_3s_3}-\varepsilon_{\varrho\mu\nu}q_3^{(\mu)}q^{(\nu)}(\sigma_\varrho)_{s'_1s_1}\delta_{s'_3s_3}\right\}$$

$$+\frac{c^2q^2\cdot\mu_0^2}{z^2-c^2q^2-\omega_p^2}\,D^T_{\mu\nu}(q)\,(\sigma_\mu)_{s'_1s_1}(\sigma_\nu)_{s'_3s_3} \qquad (25.13)$$

Letzteres beschreibt offensichtlich eine (retardierte) Biot—Savart-Kraft zwischen zwei "Strom-Elementen" in einem durch seine Plasmafrequenz ω_p charakterisierten Medium. Sie setzt sich zusammen aus einem Bahn-Bahn-, Spin-Bahn- und Spin-Spin-Anteil. Es ist auffällig, daß der skalare Teil der Wechselwirkung Q_{02} einfach das Coulombsche Elementargesetz reproduziert, der transversale Teil dagegen nur bei Vernachlässigung von $z^2-\omega_p^2$ gegen c^2q^2 *) den transversalen Teil der elementaren Wechselwirkung zweier Elektronen wiedergibt. Tatsächlich erkennt man in diesem Fall in v^S+v^T die Fourier-Transformierte der Wechselwirkungsenergie zweier Elektronen in nicht-relativistischer Näherung bis zu Größen in $(e/c)^2$ wieder, die wohl auch Breitsche Wechselwirkung heißt.[29] Es fehlen allerdings hier der "Zitterbewegungs"-Term und die beiden Terme, die die Wechselwirkung

---

*) cf. Fußnote p. 87

des Spins eines Teilchens mit dessen eigenem Bahn-Drehimpuls beschreiben. Der Grund ist offensichtlich: Die Elektronen sind von Anfang an als Schrödinger-Feld beschrieben worden, statt sie konsequenterweise als Dirac-Feld zu beschreiben und dann (nach einer Foldy-Wouthoysen-Transformation) auch für sie eine $1/c^2$-Näherung durchzuführen.

Eine solche transversale Wechselwirkung vom Biot-Savart-Typ, allerdings unretardiert und ohne die Spin-Terme, nämlich

$$v^T = -\frac{e^2}{c^2q^2+\omega_p^2}\,\delta^T_{\mu\nu}(q)\,\frac{p_1^{(\mu)}}{m}\frac{p_3^{(\nu)}}{m}\,\delta_{s_1's_1}\delta_{s_3's_3},$$

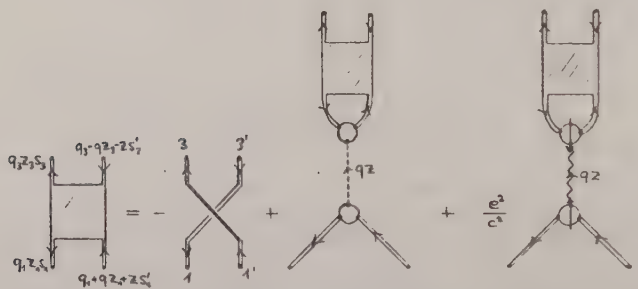
haben Bohm und Pines[30] und Pines und Nozières[31] betrachtet. Sie sehen sie als "screened magnetic interaction" an, als eine Art zu vernachlässigender Restwechselwirkung, die dann die nackte magnetische Wechselwirkung (sie wird von Pines und Nozières nie explizit angegeben!) zu ersetzen hat, wenn man den linearen Respons auf ein effektives Feld

$$A(+\mu) = A^{ext}(+\mu) + A^{ind}(+\mu)$$

betrachtet. Damit soll vermieden werden, daß "Polarisationsprozesse doppelt gezählt" werden. Es leuchtet ein, daß sie nicht doppelt gezählt werden, wenn man wie Nozières und Pines die transversale Wechselwirkung überhaupt gegenüber der Coulomb-Wechselwirkung vernachlässigt. Will man sie aber gerade nicht vernachlässigen, so ist es wichtig, ob die Deutung von Nozières und Pines richtig ist. Nach den obigen Darlegungen erscheint sie irrig: ω_p^2 hat mit Polarisationsprozessen nichts zu tun. Diese werden durch die Blase in $Q^T_{1,0}$ beschrieben. Die obige Wechselwirkung ist eine "nackte" und findet durchaus Anwendung, wenn der Respons auf ein externes transversales Feld zu berechnen ist, wie es weiter unten geschehen soll.

Die 2 -Elektronen-Funktion $G^{(2)}_{o2}$

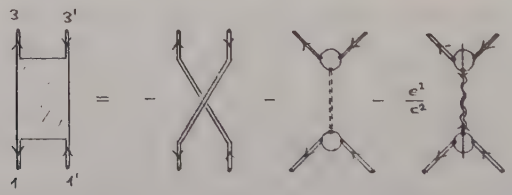
Aus der Wechselwirkung $Q^{(2)}_{o2}(1'3',13)$ bestimmt sich die 2-Elektronen-Funktion $G^{(2)}_{o2}(13,1'3')$ nach Gl. (25.3a). Leicht lösbar ist diese Gl. nur für das homogene, isotrope Medium und bei Verwendung der RPA für $Q^{(2)}_{o2}(1'3',13)$ gemäß Gl. (25.11):



(25.14)

$$G^{(2)}_{o2}(13,1'3') = -G^{(2)}_{o1}(1,3')G^{(2)}_{o1}(3,1') + G^{(2)}_{o1}(1,5')G^{(2)}_{o1}(5,1')N(2,5'5)\tfrac{\hbar}{i}V(2,2')N(2',\bar{1}'\bar{1})G^{(2)}_{o2}(\bar{1}3,\bar{1}'3')$$
$$+ G^{(2)}_{o1}(1,5')G^{(2)}_{o1}(5,1')\mathcal{C}\Gamma_{ind.}(2,5'5)\tfrac{\hbar}{i}\hat{G}^{o\tau}_{10}(2,2')\mathcal{C}\Gamma_{ind}(2',\bar{1}'\bar{1})G^{(2)}_{o2}(\bar{1}3,\bar{1}'3')$$

Denn löst man diese Gl. wieder durch Iteration nach der Inhomogenität, verschwinden alle "gemischten" Beiträge, d.h. alle Beiträge, die die skalare und die transversale Wechselwirkung enthalten, und man erhält offenbar:



(25.15)

$$G^{(2)}_{o2}(13,1'3') = -G^{(2)}_{o1}(1,3')G^{(2)}_{o1}(3,1') - G^{(2)}_{o1}(1,5')G^{(2)}_{o1}(5,1')N(2,5'5)\tfrac{\hbar}{i}V_{eff}(2,2')N(2',\bar{1}'\bar{1})G^{(2)}_{o2}(\bar{1}3')\,G^{(2)}_{o1}(3,\bar{1}')$$
$$- G^{(2)}_{o1}(1,5')G^{(2)}_{o1}(5,1')\mathcal{C}\Gamma_{ind.}(2,5'5)\tfrac{\hbar}{i}G^{(2)T}_{10}(2,2')\mathcal{C}\Gamma_{ind}(2',5'5)\,G^{(2)}_{o2}(\bar{1},3')\,G^{(2)}_{o1}(3,\bar{1}')$$

$V_{eff}(22')$ ist dabei schon in Gl. (25.5)f. definiert.

Resumée

Durch das vorgestellte Entkopplungsverfahren ist es gelungen, alle Größen, insbesondere das letztlich interessierende $Q^{(2)T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ als Funktion allein der Gleichgewichtsfunktion $G^{(2)}_{01}(1,1')$ darzustellen.*) Letztere ist ihrerseits wieder durch $Q^{(2)}_{01}(1',1)$ und $Q^{(2)}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ bestimmt.

26. Eine Vereinfachung in der RPA

Oben war die zentrale Gl.

$$Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')^{*} = Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}') + Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{4})\, G^{o\,T}_{10}(\underline{4}'\underline{4})\, Q^{T}_{10}(\underline{4}\underline{2}')^{*} \qquad (26.1)$$

in Strenge hergeleitet worden. Daß in ihr nur rein transversale Größen verknüpft erscheinen, ist eine Konsequenz der transversalen (Coulomb-)Eichung. Speziell für das RPA-$Q^{T}_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ gemäß Gl. (25.7)**) ist die physikalische Bedeutung klar: in Q^{T}_{10} ist der Effekt der skalaren Wechselwirkung schon inkorporiert, und Gl. (26.1) beschreibt das "Anziehen" von Q^{T}_{10} durch die transversale Wechselwirkung. Man wird erwarten, daß man eine Gl. analog zu Gl. (26.1) angeben kann, die diese beiden Renormalisierungen "gleichzeitig" beschreibt und einen einfacheren Kern $\widetilde{Q}_{10}\, G^{o}_{10}$ besitzt. Diese Gl. soll nun hergeleitet werden.

---

*) Im Gleichgewicht (U=0) ist $G^{T}_{1/20}(\underline{2})=0$

**) In Verbindung mit der Gl. (25.5f) unmittelbar vorher.

Zunächst schreibt sich mit der Abkürzung*)

$$Q_{10}(\underline{2}\underline{2}'):=\hbar/i\{e^2/mc^2\,\mathcal{Q}(\underline{2}\underline{2}',1'1)G_{01}(1,1')+e/c\,J_{nd}(\underline{2},1'1)G_{01}(1,3')G_{01}(3,1')e/c\,J_{nd}(\underline{2}',3'3)$$
$$+e/c\,J_{nd}(\underline{2},1'1)G_{01}(1,3')G_{01}(3,1')\mathcal{N}(4,3'3)\hbar/i\,V_{eff}(44')\mathcal{N}(4',5'5)G_{01}(5,7')G_{01}(75')e/c\,J_{nd}(\underline{2}',7'7)\} \qquad (26.2)$$

gemäß Gl. (25.7) das RPA-$Q^T_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ einfach

$$Q^T_{10}(\underline{2}\underline{2}')=\delta^T(\underline{2}\underline{4})Q_{10}(\underline{4}\underline{4}')\delta^T(\underline{4}'\underline{2}'). \qquad (26.3)$$

Dann beobachtet man, daß der rein transversale Teil

$$Q^T_{10}(\underline{2}\underline{2}')^*=\delta^T(\underline{2}\underline{4})Q_{10}(\underline{4}\underline{4}')^*\delta^T(\underline{4}'\underline{2}') \qquad (26.4)$$

der Lösung $Q_{10}(\underline{2}\underline{2}')^*$ folgender Gl.

$$Q_{10}(\underline{2}\underline{2}')^*=Q_{10}(\underline{2}\underline{2}')+Q_{10}(\underline{2}\underline{4}')G^{oT}_{10}(\underline{4}'\underline{4})Q_{10}(\underline{4}\underline{2}')^* \qquad (26.5)$$

offenbar Lösung von Gl. (26.1) ist. Mit Hilfe der folgenden (mit der Definition (21.1) konsistenten) Definition:

$$\overset{-1}{G}{}^{o}_{10}(\mathbf{r}\mu t,\mathbf{r}'\mu' t'):=-1/c^2\,\partial^2/\partial t^2\,\delta^L_{\mu\mu'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t')-\Box\,\delta^T_{\mu\mu'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t'), \qquad (26.6)$$

so daß gilt

$$G^o_{10}(\underline{2}\underline{2}')=G^{oL}_{10}(\underline{2}\underline{2}')+G^{oT}_{10}(\underline{2}\underline{2}'), \qquad (26.7)$$

läßt sich diese Gl. schreiben:

$$Q_{10}(\underline{2}\underline{2}')^*=Q_{10}(\underline{2}\underline{2}')+Q_{10}(\underline{2}\underline{4}')G^o_{10}(\underline{4}'\underline{4})Q_{10}(\underline{4}\underline{2}')^*-Q_{10}(\underline{2}\underline{4}')G^{oL}_{10}(\underline{4}'\underline{4})Q_{10}(\underline{4}\underline{2}')^*. \qquad (26.8)$$

Diese Gl. wird nun auf die gewünschte Gestalt gebracht, indem $Q_{10}(\underline{2}\underline{2}')$ mit Hilfe der Kontinuitätsgl. umgeformt wird. Diese Umformungen lassen sich besser in Fourier-Darstellung als in Ort-Zeit-Darstellung formulieren. Zum Beispiel ist ($v_{eff}:=1/c^2\,V_{eff}$):

$$Q^{(\mu\nu)}_{10}(qq',z)=-1/c^2\{\overset{o}{\chi}_{j_\mu j_\nu}(qq',z)-\omega_p^2(qq')\delta_{\mu\nu}\}+(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}\bar{q}'}1/c\,\overset{o}{\chi}_{j_\mu\varrho}(q\bar{q}',z)v_{eff}(\bar{q}'\bar{q},z)\,1/c\,\overset{o}{\chi}_{\varrho j_\nu}(\bar{q}q',z) \qquad (26.9)$$

Dabei sind die Funktionen

$$\overset{o}{\chi}_{j_\mu j_\nu}(\underline{2}\underline{2}'):=-\hbar/i\,e\,J_{nd}(\underline{2},1'1)G_{01}(1,3')G_{01}(3,1')e\,J_{nd}(\underline{2}',3'3) \qquad (26.10)$$

u.ä. die Korrelationsfunktionen für freie Teilchen in dem selbstkonsistent zu bestimmenden Feld - entsprechend der oben diskutierten RPA-Selbstenergie.

---

*) Die Superfixe "(2)" werden nicht mehr eigens angeschrieben.

Aus der Kontinuitätsgl. folgt für sie:

$$z\chi^{\circ}_{j^{\mu}j^{\rho}}(qq',z)=\{\chi^{\circ}_{j^{\mu}j^{\nu}}(qq',z)-\omega_p^2(qq')\delta_{\mu\nu}\}q'^{(\nu)}$$
$$z\chi^{\circ}_{j^{\rho}j^{\nu}}(qq',z)=q^{(\mu)}\{\chi^{\circ}_{j^{\mu}j^{\nu}}(qq',z)-\omega_p^2(qq')\delta_{\mu\nu}\}\,, \qquad (26.11)$$

so daß mit der Abkürzung

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq';z):=-\tfrac{1}{c^2}\{\chi^{\circ}_{j^{\mu}j^{\nu}}(qq';z)-\omega_p^2(qq')\delta_{\mu\nu}\} \qquad (26.12)$$
$$\Leftrightarrow\ \tilde{Q}_{\lambda\lambda'}(\underline{z}\underline{z}'):=\tfrac{\hbar}{i}\{\tfrac{e}{c}T_{nd}(\underline{z},\lambda'\lambda)G_{o\lambda}(\lambda,3')G_{o\lambda'}(3,\lambda')\tfrac{e}{c}T_{nd}(\underline{z}',3'3)+\tfrac{e^2\hbar}{mc^2}\mathcal{Q}(\underline{z}\underline{z}',\lambda'\lambda)G_{o\lambda}(\lambda,\lambda')\}$$

sich $Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)$ folgendermaßen schreiben läßt:

$$Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)=\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)+(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}'\bar{q}}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\bar{q}'^{(\rho)}(c/z)^2\,v_{eff}(\bar{q}'\bar{q},z)\bar{q}^{(\sigma)}\tilde{Q}^{(\sigma\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)$$

Daher lautet Gl. (26.8) ausgedrückt durch $\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)$

$$\begin{aligned}
Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)^{*}=\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)&+c^2/z^2(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}'\bar{q}}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\bar{q}'^{(\rho)}v_{eff}(\bar{q}'q',z)\bar{q}^{(\sigma)}\tilde{Q}^{(\sigma\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)\\
&+(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}'\bar{q}}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\,G^{o(\rho\sigma)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}'\bar{q},z)Q^{(\sigma\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)^{*}\\
&+c^2/z^2(1/\Omega)^4\sum_{\bar{q}\bar{q}',\bar{q}\bar{q}'}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\bar{q}'^{(\rho)}v_{eff}(\bar{q}'\bar{q},z)\bar{q}^{(\sigma)}\tilde{Q}^{(\sigma\tau)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}\bar{q}',z)\,G^{o(\tau\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}'\bar{q},z)Q^{(\tau\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)^{*}\\
&-(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}'\bar{q}}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\,G^{o(\rho\sigma)}_{\lambda\lambda'L}(\bar{q}'\bar{q},z)Q^{(\sigma\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)^{*} \qquad (26.13)\\
&-c^2/z^2(1/\Omega)^4\sum_{\bar{q}\bar{q},\bar{q}\bar{q}'}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\bar{q}'^{(\rho)}v_{eff}(\bar{q}'\bar{q},z)\bar{q}^{(\sigma)}\tilde{Q}^{(\sigma\tau)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}\bar{q}',z)\,G^{o(\tau\nu)}_{\lambda\lambda'L}(\bar{q}'\bar{q},z)Q^{(\tau\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)^{*}
\end{aligned}$$

Wegen der Beziehung *)

$$G^{o(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'L}(qq',z)=\Omega\,\delta_{qq'}\delta^{L}_{\mu\nu}(q)\,c^2/z^2$$
$$=(c/z)^2q^{(\mu)}\{\Omega\delta_{qq'}\cdot 1/q^2\}q'^{(\nu)}\equiv(c/z)^2q^{(\mu)}v(qq')q'^{(\nu)}$$

läßt sich diese Gl. umordnen zu

$$\begin{aligned}
Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)^{*}=\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\lambda'}(qq',z)&+(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}'\bar{q}}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\,G^{o(\rho\sigma)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}'\bar{q},z)\,Q^{(\sigma\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}'q',z)^{*}\\
&+c^2/z^2(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}'\bar{q}}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\bar{q}'^{(\rho)}v_{eff}(\bar{q}'\bar{q},z)\bar{q}^{(\sigma)}\times\\
&\times\{\tilde{Q}^{(\sigma\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)+(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}\bar{q}'}\tilde{Q}^{(\sigma\tau)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}\bar{q}',z)\,G^{o(\tau\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}'\bar{q},z)Q^{(\tau\nu)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',z)^{*}\} \qquad (26.14)\\
&-c^2/z^2(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}\bar{q}'}\tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{\lambda\lambda'}(q\bar{q}',z)\bar{q}'^{(\rho)}\{v(\bar{q}'\bar{q})+(1/\Omega)^2\sum_{\bar{q}\bar{q}'}v_{eff}(\bar{q}'\bar{q},z)\bar{q}^{(\sigma)}\tilde{Q}^{(\sigma\tau)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}\bar{q}',z)(c/z)^2\bar{q}'^{(\tau)}v(\bar{q}'\bar{q})\}q'^{(\nu)}Q^{(\nu\nu')}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}q',
\end{aligned}$$

Die letzte geschweifte Klammer ist einfach $v_{eff}(\bar{q}'\bar{q})$. Denn nach der Kontinuitätsgl. ist

$$(c/z)^2\bar{q}^{(\sigma)}\tilde{Q}^{(\sigma\tau)}_{\lambda\lambda'}(\bar{q}\bar{q}',z)\bar{q}'^{(\tau)}=-\chi^{\circ}_{jj}(\bar{q}\bar{q}',z), \qquad (26.15)$$

---

*) Dieser Zusammenhang zwischen longitudinalem Projektor und (direkter) Coulomb-Wechselwirkung ist der Kern des Beweises. Daher ist Beschränkung auf die RPA in diesem Abschnitt wichtig.

so daß diese Klammer sich als

$$v_{\sigma\sigma}(\vec{q}'\vec{q},z) = v(\vec{q}'\vec{q}) - (1/\Omega)^2 \sum_{\vec{q}''\vec{q}'''} v_{\sigma\sigma}(\vec{q}''\vec{q}''',z)\, \chi^{\circ}_{\varrho\varrho}(\vec{q}''\vec{q}'',z)\, v(\vec{q}'''\vec{q})$$

die RPA-Gl., cf. Gl. (25.5f), für die effektive Wechselwirkung entpuppt. Die fragliche Gl. formt sich also, indem man alles auf die linke Seite schafft, um zu:

$$\{Q^{(\tau\nu)}_{\mu\nu}(qq',z)^* - \tilde{Q}^{(\tau\nu)}_{\mu\nu}(qq',z) - (1/\Omega)^2 \sum_{\vec{q}''\vec{q}''} \tilde{Q}^{(\tau\varrho)}_{\mu\nu}(q\vec{q}'',z)\, G^{\circ(\varrho\sigma)}_{\mu\nu}(\vec{q}''\vec{q}',z)\, Q^{(\sigma\nu)}_{\mu\nu}(\vec{q}q',z)^*\} \qquad (26.16)$$

$$+(1/\Omega)^2 (1/\Omega)^2 \sum_{\vec{q}''\vec{q}''} \tilde{Q}^{(\tau\varrho)}_{\mu\nu}(q\vec{q}'',z)\, \tilde{q}''^{(\varrho}\, v_{\sigma\sigma'}(\vec{q}''\vec{q}',z)\, \tilde{q}''^{\sigma')} \{Q^{(\sigma\nu)}_{\mu\nu}(\vec{q}q',z)^* - \tilde{Q}^{(\sigma\nu)}_{\mu\nu}(\vec{q}q',z) - (1/\Omega)^2 \sum_{\vec{q}''\vec{q}''} \tilde{Q}^{(\sigma\tau)}_{\mu\nu}(\vec{q}\vec{q}''z)\, G^{\circ(\tau\upsilon)}_{\mu\nu}(\vec{q}''\vec{q}',z)\, Q^{(\upsilon\nu)}_{\mu\nu}(\vec{q}q',z)^*\} = 0$$

$Q^{(\tau\nu)}_{\mu\nu}(qq',z)^*$ erfüllt diese Gl. a fortiori, wenn es die Gl.

$$Q^{(\tau\nu)}_{\mu\nu}(qq',z)^* = \tilde{Q}^{(\tau\nu)}_{\mu\nu}(qq',z) + (1/\Omega)^2 \sum_{\vec{q}''\vec{q}''} \tilde{Q}^{(\tau\varrho)}_{\mu\nu}(q\vec{q}'',z)\, G^{\circ(\varrho\sigma)}_{\mu\nu}(\vec{q}''\vec{q}',z)\, Q^{(\sigma\nu)}_{\mu\nu}(\vec{q}q',z)^* \qquad (26.17a)$$

erfüllt.

Diese Gl. - sie lautet in Ort-Zeit-Darstellung zurücktransformiert

$$Q_{\mu\nu}(2\underline{2}')^* = \tilde{Q}_{\mu\nu}(2\underline{2}') + \tilde{Q}_{\mu\nu}(2\underline{4}')\, G^{\circ}_{\mu\nu}(4'\underline{4})\, Q_{\mu\nu}(4\underline{2}')^* \qquad (26.17b)$$

- hat offenbar die erwartete Gestalt. Sie ist - insbesondere im Hinblick auf Gl. (26.12) - das genaue Analogon zu der gewöhnlichen RPA für die Dichte-Korrelationsfunktion: $G^{\circ}_{\mu\nu}$ beschreibt das "Anziehen" der "freien" Funktion $\tilde{Q}_{\mu\nu}$ und zwar der longitudinale Teil $G^{\circ L}_{\mu\nu}$ durch die skalaren und der transversale Teil $G^{\circ T}_{\mu\nu}$ durch die transversalen Photonen.

Diese Formulierung mit Hilfe von $\tilde{Q}_{\mu\nu}$ hat offenbar Vorteile. $\tilde{Q}_{\mu\nu}$ ist eine einfachere Funktion. In sie geht allein die Stromdichte-Korrelation für freie Teilchen in einem selbstkonsistenten Feld und die Gleichgewichtsdichte ein.*) Sie bietet sich daher eher für Näherungen an als $Q^{T}_{\mu\nu}$. Insbesondere stellt sie die Verbindung her zwischen der vorge-

---

*) Außerdem ist $\tilde{Q}_{\mu\nu}(2\underline{2}')$ stärker lokalisiert als Funktionen wie $Q^{T}_{\mu\nu}(2\underline{2}')$, die mit den lang-reichweitigen Funktionen $\delta^{T}(2\underline{4})$ u.ä. gefaltet sind.

legten Behandlung des Transport-Problems durch (imaginärzeitige) Green-Funktionen und der mit Hilfe der Boltzmann-Vlasov-Gl. Denn die mit Hilfe der (stoßfreien) Boltzmann-Vlasov-Gl. bestimmte Leitfähigkeit $\sigma_{\mu\nu}(\pm x', z)$ ist offensichtlich die (semi-)klassische Näherung für $\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{10}(\pm x', z)$:

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{10}(\pm x', z) \approx -i z\, \sigma_{\mu\nu}(\pm x', z)/c^2 . \qquad (26.18)$$

27. Störungsrechnung für Korrekturen $\delta\tilde{Q}_{10}$ bzw. δQ^{T}_{10}

Den Effekt von Korrekturen $\delta\tilde{Q}_{10}(22')$ bzw. $\delta Q^{T}_{10}(22')$ an $\tilde{Q}_{10}(22')$ bzw. $Q^{T}_{10}(22')$, wie sie z.B. durch eine Variation des Dichteprofils des betrachteten Systems etc. bedingt sein können, auf die $Q_{10}(22')^{*}$ bzw. $Q^{T}_{10}(22')^{*}$ - und damit auf die RTK - bestimmt eine weitere der Gl. (26.17) ganz analoge Gl. Sie ist leicht zu gewinnen:

$$Q_{10}(2\bar{2}')^{*} + \delta Q_{10}(2\bar{2}')^{*} = \tilde{Q}_{10}(2\bar{2}') + \delta\tilde{Q}_{10}(2\bar{2}') + (\tilde{Q}_{10}(2\bar{4}') + \delta\tilde{Q}_{10}(2\bar{4}'))\, G^{\circ}_{10}(\bar{4}'\bar{4})\,(Q_{10}(4\bar{2}')^{*} + \delta Q_{10}(4\bar{2}')^{*})$$

Mit Blick auf Gl. (26.17) folgt

$$\{\delta(2\bar{4}) - \tilde{Q}_{10}(2\bar{4}')\, G^{\circ}_{10}(\bar{4}'\bar{4})\}\,\delta Q_{10}(4\bar{2}')^{*} - \delta\tilde{Q}_{10}(2\bar{4}')\{\delta(4'\bar{2}') + G^{\circ}_{10}(\bar{4}'\bar{4})\, Q_{10}(4\bar{2}')^{*}\} + \delta\tilde{Q}_{10}(2\bar{4}')\, G^{\circ}_{10}(\bar{4}'\bar{4})\,\delta Q_{10}(4\bar{2}')^{*}.$$

Aus Gl. (26.17) folgt weiter, daß

$$\{\delta(2\bar{2}) + Q_{10}(2\bar{6}')^{*}\, G^{\circ}_{10}(\bar{6}'\bar{2})\}\{\delta(\bar{2}\bar{4}) - \tilde{Q}_{10}(\bar{2}\bar{4}')\, G^{\circ}_{10}(\bar{4}'\bar{4})\} = \{\delta(2\bar{2}) - \tilde{Q}_{10}(2\bar{6}')\, G^{\circ}_{10}(\bar{6}'\bar{2})\}\{\delta(\bar{2}\bar{4}) + Q_{10}(2\bar{6}')^{*}\, G^{\circ}_{10}(\bar{6}'\bar{2})\} = \delta(2\bar{4})$$

gilt, die Klammer-Ausdrücke also zu einander invers sind. Mit ihrer Hilfe formt sich die zuletzt angeschriebene Gl. um zu:

$$\delta Q_{10}(2\bar{2}')^{*} - \delta Q_{10}(2\bar{2}')^{*}_{101} + \delta Q_{10}(2\bar{4}')^{*}_{101}\{\delta(4'\bar{6}') - G^{\circ}_{10}(4'\bar{2})\,\tilde{Q}_{10}(\bar{2}\bar{6}')\}\, G^{\circ}_{10}(\bar{6}'\bar{4})\,\delta Q_{10}(4\bar{2}')^{*}$$

$$\delta Q_{10}(2\bar{2}')^{*}_{101} := \{\delta(2\bar{4}) + Q_{10}(2\bar{6}')^{*}\, G^{\circ}_{10}(\bar{6}'\bar{4})\}\,\delta\tilde{Q}_{10}(\bar{4}\bar{4}')\{\delta(4'\bar{2}') + G^{\circ}_{10}(\bar{4}'\bar{6})\, Q_{10}(\bar{6}\bar{2}')^{*}\} \qquad (27.1)$$

Mit ganz denselben Schlüssen folgt

$$\delta Q^{T}_{10}(2\,2')^{*} = (\{\delta^{T}(2\,4) + Q^{T}_{10}(2\,\bar{6})^{*}\, G^{\sigma T}_{10}(\bar{6}'\,4)\}\,\delta O^{T}_{10}(4\,4')\{\delta^{T}(4'\,2') + G^{\sigma T}_{10}(4'\,\bar{6})\, Q^{T}_{10}(\bar{6}\,2')^{*}\})$$
$$+(\{\delta^{T}(2\,\bar{4}) + Q^{T}_{10}(2\,\bar{6})^{*}\, G^{\sigma T}_{10}(\bar{6}'\,\bar{4})\}\,\delta O^{T}_{10}(\bar{4}\,\bar{4}')\{\delta^{T}(\bar{4}'\,4') + G^{\sigma T}_{10}(\bar{4}'\,\bar{6})\, Q^{T}_{10}(\bar{6}\,4')^{*}\})\cdot$$
$$\cdot(\{\delta^{T}(4'\,6') - G^{\sigma T}_{10}(4'\,\bar{8})\, Q^{T}_{10}(\bar{8}\,6')\}\, G^{\sigma T}_{10}(6'\,4)\,\delta Q^{T}_{10}(4\,2')^{*} \qquad (27.2)$$

Diese Gln. haben - wie angekündigt - die Struktur einer Dyson-Gl. Die Inhomogenitäten stellen die in $\delta\tilde{Q}_{10}$ bzw. δQ^{T}_{10} lineare Näherung für δQ^{*}_{10} bzw. δQ^{*T}_{10} dar. Sie sollen weiter unten zur Bestimmung von Korrekturen an den RTK herangezogen werden. Eine Verschiebung der Pole der RTK bzw. zusätzliche Pole können natürlich nur über eine Lösung dieser Gln. bestimmt werden.

VI. Das einkomponentige Modell. Ein Vergleich

28. RPA-Stromdichte-Korrelationsfunktionen

An dieser Stelle erscheint es sinnvoll, zu prüfen, ob man nicht einfacher zurechtgekommen wäre, wenn man statt des obigen Entkopplungsverfahrens für ein zweikomponentiges System lineare Responstheorie eines reinen Elektronensystems getrieben hätte, das gemäß dem Potential*)32

$$\left(\frac{e^2}{q^2} - \frac{e^2}{c^2q^2}\,\delta^{T}_{\mu\nu}(q)\,P^{(r)}_{\perp}\frac{P^{(\nu)}_{3}}{m^2}\right)\delta_{s'_4s_4}\delta_{s'_3s_3} \qquad (28.1a)$$

oder auch

$$\left(\frac{e^2}{q^2} - \frac{e^2}{c^2q^2+\omega_p^2}\,\delta^{T}_{\mu\nu}(q)\,\frac{P^{(r)}_{\perp}P^{(\nu)}_{3}}{m^2}\right)\delta_{s'_4s_4}\delta_{s'_3s_3} \qquad (28.1b)$$

wechselwirkt.

Zu diesem Zweck genügt es, den Fall des homogenen und isotropen Mediums zu betrachten. Dann gilt**)

$$Q^{T}_{10}(\mu\nu;qz) = \delta^{T}_{\mu\nu}(q)\,Q^{T}_{10}(qz) \qquad (28.2)$$

---

*) Der Einfachheit halber sollen die Spin-Anteile an der

und ähnlich für die anderen Tensorfunktionen. Speziell gilt natürlich

$$Q^T_{10}(qz)^* = -1/c^2 \{\chi^T_{jj}(qz) - \omega_p^2\} \tag{28.3}$$

Aus Gl. (24.15) folgt sogleich

$$Q^T_{10}(qz)^* = \frac{Q^T_{10}(qz)}{1 - G^{oT}_{10}(qz)Q^T_{10}(qz)} \tag{28.4}$$

d.h.

$$\chi^T_{jj}(qz) - \omega_p^2 = \frac{-c^2 Q^T_{10}(qz)}{1 - c^2 Q^T_{10}(qz)/(z^2 - c^2q^2)} \tag{28.5}$$

In RPA ist Q^T_{10} durch die ersten beiden Terme der Gl. (25.7) gegeben:

$$Q^T_{10}(qz) = -1/c^2 \{\chi^{oT}_{jj}(qz) - \omega_p^2\} \tag{28.6}$$

mit

$$\chi^o_{j_\mu j_\nu}(qz) := -\frac{\hbar}{i}\, 1/\Omega\, (-1/i\beta\hbar) \sum_{\substack{\bar q \bar z\\ s s'}} e^{i\bar z\varepsilon} \left\{\frac{e\hbar}{m}(\bar q - q/2)^{(\mu)}\delta_{s's} + ic\varepsilon_{\mu\kappa\lambda} q^{(\kappa)}(\mu_B\sigma_\lambda)_{s's}\right\}\cdot$$
$$\cdot\left\{\frac{e\hbar}{m}(\bar q - q/2)^{(\nu)}\delta_{s's} - ic\varepsilon_{\nu\varrho\sigma} q^{(\varrho)}(\mu_B\sigma_\sigma)_{ss'}\right\} G_{01}(\bar q\bar z)\, G_{01}(\bar q - q\, \bar z - z). \tag{28.7}$$

Nähert man G_{01} (qz) durch die freie Green-Funktion G^o_{01} (qz)***)

$$G^o_{01}(qz) = \frac{1}{\hbar z - \varepsilon_q} \tag{28.8}$$

so folgt näherhin ($n^o_q := (e^{\beta\varepsilon_q} + 1)^{-1}$):

$$\chi^{oT}_{jj}(qz) = -\delta^T_{\mu\nu}(q)\frac{1}{\Omega}\sum_{\bar q} e^2 \frac{\hbar\bar q^{(\mu)}\hbar\bar q^{(\nu)}}{m^2}\, \frac{n^o_{\bar q} - n^o_{\bar q - q}}{\varepsilon_{\bar q} - \varepsilon_{\bar q - q} - \hbar z} - e^2\left(\frac{\hbar q}{2m}\right)^2 \frac{2}{\Omega}\sum_{\bar q} \frac{n^o_{\bar q} - n^o_{\bar q - q}}{\varepsilon_{\bar q} - \varepsilon_{\bar q - q} - \hbar z} \tag{28.9}$$

Breitschen Wechselwirkung hier außer Betracht bleiben.

**) Q^T_{10} (qz) ist im wesentlichen die transversale Leitfähigkeit, $Q^T_{10}(qz) = -iz\sigma^T(qz)/c^2$, cf. P.C. Martin loc. cit.[3]

***) Das ist eine über die RPA hinaus zusätzliche Näherung, insofern jetzt auch der Term $-e^2/2mc^2\, \mathcal{Q}(22', 1'1)\, \hbar/i\, G^T_{10}(22')$ in der Selbstenergie vernachlässigt wird.

Es folgt für die volle transversale Strom-Strom-Korrelation:[31]

$$\chi^{T}_{jj}(qz) - \omega_p^2 = \frac{\chi^{\sigma T}_{jj}(qz) - \omega_p^2}{1 + (\chi^{\sigma T}_{jj}(qz) - \omega_p^2)/(z^2 - c^2q^2)} \qquad (28.10)$$

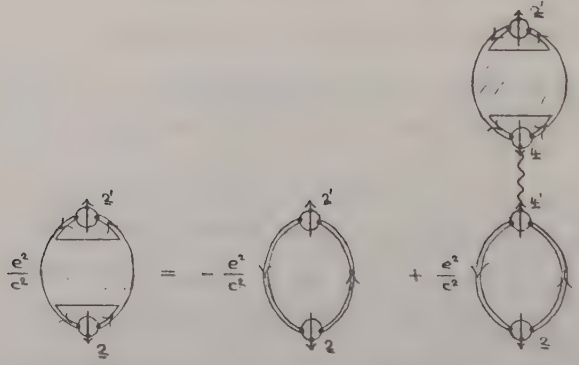
Kann dieses Ergebnis von dem zuletzt konzipierten Modell des Coulombsch und magnetisch wechselwirkenden Elektronengases reproduziert werden? Es wird sich zeigen: Nein! Andererseits wird die Korrelationsfunktion für die nicht-diamagnetischen Stromdichten so gut reproduziert, wie man es von diesem Modell vernünftigerweise erwarten kann.

Die Korrelationsfunktion für die nicht-diamagnetischen Strom-Anteile ist

$$\chi^{nd\,T}_{jj}(\underline{2}\,\underline{2}') = \frac{\hbar}{i}\,\frac{e}{c}\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{2};1'\lambda)\,\frac{e}{c}\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{2}';3'3)\,G_{o2}(13,1'3') \qquad (28.11)$$

Für das homogene und isotrope Medium folgt in RPA gemäß Gl. (25.14)

$$\chi^{nd\,T}_{jj}(\underline{2}\,\underline{2}') = -\frac{\hbar}{i}\,\%\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{2},1'\lambda)\,G^{(2)}_{o1}(1,3')\,G^{(2)}_{o1}(3,1')\,\%\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{2}',3'3)$$
$$+\frac{\hbar}{i}\,\%\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{2},1'\lambda)\,G^{(2)}_{o1}(1,5')\,G^{(2)}_{o1}(5,1')\,\%\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{4},5'5)\,\frac{\hbar}{i}\,\hat{G}^{\sigma T}_{j0}(\underline{4}\,\underline{4}')\,\%\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{4}',7'7)\,G^{(2)}_{o2}(73,7'3')\,\%\,\Gamma^{T}_{nd}(\underline{2}',3'3) \qquad (28.12)$$



Denn die skalare Wechselwirkung liefert in dieser Näherung keinen Beitrag zum transversalen Teil der Korrelationsfunktion (cf.p. 93f).

Fourier-Transformation führt auf

$$\chi^{ind,T}_{jj}(qz) = \chi^{o,T}_{jj}(qz) - \chi^{o,T}_{jj}(qz) \cdot 1/(z^2 - c^2q^2 - \omega_p^2) \cdot \chi^{ind,T}_{jj}(qz)$$

also

$$\chi^{ind,T}_{jj}(qz) = \frac{\chi^{o,T}_{jj}(qz)}{1 - \chi^{o,T}_{jj}(qz)/(z^2 - c^2q^2 - \omega_p^2)} \qquad (28.13)$$

29. Diskussion des einkomponentigen Modells

Bei Vernachlässigung der Dynamik der Ionen ($M \to \infty$) lautet der Hamilton-Operator für das zuletzt konzipierte Modell

$$H_0 = \sum_{sq} (\hbar q)^2/2m \, C^+(qs) C(qs)$$
$$+ 1/2\Omega \sum_{q \neq 0} e^2/q^2 \sum_{s,q_1,s_2,q_2} C^+(q_2 - qs_2) C^+(q_1 + qs_1) C(q_1 s_1) C(q_2 s_2)$$
$$- 1/2\Omega \sum_{q \neq 0} e^2 f(q) \cdot \delta^T_{\mu\nu}(q) \sum_{s,q_1,s_2,q_2} \frac{\hbar q_1^{(\mu)} \hbar q_2^{(\nu)}}{m^2} C^+(q_2 - qs_2) C^+(q_1 s_1) C(q_1 s_1) C(q_2 s_2) . \qquad (29.1)$$

Dabei bleibe zunächst noch offen, wie die magnetische Wechselwirkung aussehen soll, ob also

$$f(q) := c^2q^2 \quad \text{oder} \quad f(q) := c^2q^2 + \omega_p^2$$

zu wählen ist. C(qs), $C^+(qs)$ sind wie üblich die Impuls-Vernichter bzw. Erzeuger. Die q=0-Komponente in den potentiellen Energie-Termen kompensieren sich: Ladungs-Neutralität und Stromlosigkeit werden vorausgesetzt.

Die nicht-relativistische Beschreibung des Elektronensystems verlangt offenbar die Einschränkung $v_F/c \ll 1$. Das heißt aber auch, daß der Dichte-Parameter r_s ($\Omega/N = 4\pi/3 (r_s a_0)^3$) durch

$$r_s \gg (3\pi^2)^{1/3} \alpha \approx 0{,}02$$

($\alpha = e^2/\hbar c$, Feinstruktur-Konstante) nach unten beschränkt sein muß.

Die Ankopplung des Systems H_0 an ein externes Feld $A_r^{ext}(+t)$ erfolgt wie üblich durch den Übergang

$$v^{(r)} = \frac{\hbar q^{(r)}}{m} \rightarrow v^{(r)} = \frac{1}{m}\left(\hbar q^{(r)} - \frac{e}{c} A_r^{ext}(+t)\right) \qquad (29.2)$$

Der Stromdichte-Operator dieses Systems wird durch

$$j_r(\pm) := (\delta H_0 / \delta A_r^{ext}(\pm))_{A^{ext}=0} \Leftrightarrow j_r(q) := (\delta H_0 / \delta A_r^{ext}(q)^*)_{A^{ext}=0}$$

definiert. Man erhält

$$j_r(q) = e\{\sum_{ks} \hbar(k-q/2)^{(r)}/m\, C^+(k-qs)C(ks)$$
$$- \tfrac{1}{\Omega}\sum_{\tilde{q}\neq 0} \tfrac{1}{\varepsilon}(\tilde{q})\, \delta^T_{rv}(\tilde{q})\, \tfrac{e}{m} \sum_{s_2 k_2} C^+(k_2+\tilde{q}-qs_2)\{e\sum_{k_1 s_1} \hbar k_1^{(v)}/m\, C^+(k_1-\tilde{q}s_1)C(k_1s_1)\}C(k_2s_2)\} \qquad (29.3)$$

Der erste Term ist der gewöhnliche nicht-diamagnetische Strom-Operator $j_r^{nd.}(q)$; der zweite offensichtlich der diamagnetische Strom $j_r^{d.}(q)$ in einer $1/c^2$-Näherung. Der Ladungsdichte-Operator $\varrho(q)$ ist, wie üblich, $e\sum_{ks} C^+(k-qs)C(ks)$
Man prüft leicht nach, daß $\varrho(q)$ und $j_r(q)$ die Kontinuitätsgl. erfüllen.

Zur Bestimmung zunächst der Korrelationsfunktion

$$\tfrac{i}{\hbar} \langle T\, j_r^{nd.}(qt)^+\, j_r^{nd.}(qt')\rangle$$

betrachte man die Bewegungsgl. der Greenfunktion

$$\langle T(C^+(kst)C(k-qst))(C^+(k's't')C(k'+qs't'))\rangle$$

bzw. ihrer Fourier-Transformierten (bez. der Zeit t-t')

$$\ll C^+(ks)C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs');\, z\gg .$$

Sie errechnet sich aus H_0 zu

$$\{\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q} + \hbar z\}\ll C^+(ks)C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs');z\gg$$
$$= \tfrac{\hbar}{i}\,\delta_{ss'}\,\delta_{k',k-q}\{\langle C^+(k-qs)C(k-qs)\rangle - \langle C^+(ks)C(ks)\rangle\}$$
$$- \tfrac{1}{\Omega}\sum_{\tilde{q}\neq 0} \tfrac{1}{\varepsilon^2}\cdot e\{\ll C^+(k-\tilde{q}s)\varrho^+(\tilde{q})C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs');z\gg$$
$$- \ll C^+(ks)\varrho^+(\tilde{q})C(k-q+\tilde{q}s), C^+(k's')C(k'+qs');z\gg$$
$$+ \tfrac{1}{\Omega}\sum_{\tilde{q}\neq 0} \tfrac{1}{\varepsilon}(\tilde{q})\cdot e\{\hbar k_r^{(r)}/m \ll C^+(k-\tilde{q}s) j_r^{nd.T}(\tilde{q})^+ C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs');z\gg$$
$$- \hbar(k-q)^{(r)}/m \ll C^+(ks) j_r^{nd.T}(\tilde{q})^+ C(k-q+\tilde{q}s), C^+(k's')C(k'+qs');z\gg\}$$

Die in der Bewegungsgl. auftretenden 6-Punkt-Funktionen sollen wieder in RPA behandelt werden, d.h. durch "Hartree-Faktorisierung" auf 4-Punkt- und 2-Punkt-Funktionen zurückgeführt werden.[52] Das ist nicht ohne Willkür. Es ist sinnvoll, die beiden Möglichkeiten, Erzeuger oder Vernichter aus dem Ladungsdichte- bzw. Stromdichte-Operator vorbeizuziehen, damit die Operatoren, die für das Ausfaktorisieren kandidieren, präpariert werden, mit gleichem Gewicht zu berücksichtigen; also z.B.

$$
\begin{aligned}
&\ll C^+(k-\bar{q}s)\varrho^+(\bar{q})C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&= \tfrac{1}{2}\ll[C^+(k-\bar{q}s)C(k-qs), \varrho^+(\bar{q})]_+, C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&+\tfrac{1}{2}\ll C^+(k-\bar{q}s)[\varrho^+(\bar{q}), C(k-qs)]_-, C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&+\tfrac{1}{2}\ll[C^+(k-\bar{q}s), \varrho^+(\bar{q})]_- C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&= \tfrac{1}{2}\ll[C^+(k-\bar{q}s)C(k-qs), \varrho^+(\bar{q})]_+, C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&- e\cdot\tfrac{1}{2}\ll C^+(k-\bar{q}s)C(k-\bar{q}-qs), C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&- e\cdot\tfrac{1}{2}\ll C^+(ks)C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg
\end{aligned}
$$

Ausdrücke wie die beiden letzten Terme erzeugen in der Bewegungsgl. divergente Beiträge. Allerdings, eine Gruppe dieser Beiträge kompensiert sich, und die andere Gruppe besteht aus Vielfachen der betrachteten Green-Funktion. Daher können diese divergenten Faktoren in der geschweiften Klammer auf der linken Seite gesammelt werden, wo sie "nur" eine Renormalisierung der Ein-Teilchen-Energien bewirken und hinfort "vergessen" werden sollen. Die Hartree- (d.h. Vernachlässigung der Austausch-Beiträge) Faktorisierung erfolgt nach dem Muster

$$
\begin{aligned}
&\tfrac{1}{2}\ll[C^+(k-\bar{q}s)C(k-qs), \varrho^+(\bar{q})]_+, C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&= \delta_{\bar{q}q}\langle C^+(k-qs)C(k-q\varepsilon)\rangle\ll\varrho^+(q), C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg \\
&+\langle\varrho^+(\bar{q})\rangle\ll C^+(k-\bar{q}s)C(k-qs), C^+(k's')C(k'+qs'); z\gg
\end{aligned}
$$

Nun ist der Erwartungswert der Ladungsdichte nur für $\vec{q}=0$ von Null verschieden, derjenige der Stromdichte verschwindet überhaupt. Daher folgt für die Bewegungsgl. in RPA:

$$\{\varepsilon_{\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar z\}\ll C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}-\vec{q}s),C^+(\vec{k}'s')C(\vec{k}'+\vec{q}s');z\gg$$

$$=\hbar/i\,\delta_{ss'}\,\delta_{\vec{k}',\vec{k}-\vec{q}}\{\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle\}$$

$$-\tfrac{1}{\Omega}\cdot e/q^2\{\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle\}\ll\varrho^+(\vec{q}),C^+(\vec{k}'s')C(\vec{k}'+\vec{q}s');z\gg$$

$$+\tfrac{1}{\Omega}\cdot e/\varepsilon(q)\cdot\hbar\vec{k}(r)/m\{\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle\}\ll j^{\perp T}_{\vec{q}r}(\vec{q})^+,C^+(\vec{k}'s')C(\vec{k}'+\vec{q}s');z\gg$$

Mit dieser Gl. mögen zwei Tests durchgeführt werden:

1. Multiplikation mit der Elektronenladung e und Summation über $\vec{k}',s'$ führt auf

$$\{\varepsilon_{\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar z\}\ll C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}-\vec{q}s),\varrho(\vec{q});z\gg$$

$$=\hbar/i\,e\{\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle\}$$

$$-\tfrac{1}{\Omega}\cdot e/q^2\{\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle\}\ll\varrho^+(\vec{q}),\varrho(\vec{q});z\gg,$$

da im homogenen und isotropen Medium $\ll j^{\perp T}_{\vec{q}r}(\vec{q})^+,\varrho(\vec{q});z\gg$ aus Gründen der Symmetrie verschwindet. Division durch $\{\varepsilon_{\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar z\}$, Multiplikation mit $e\cdot i/\hbar\cdot 1/\Omega$ und Summation über $\vec{k},s$ führt auf

$$\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{i}{\hbar}\ll\varrho^+(\vec{q}),\varrho(\vec{q});z\gg=-\frac{e^2}{\Omega}\sum_{\vec{k}s}\frac{\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle}{\varepsilon_{\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar z}$$

$$+\frac{1}{q^2}\cdot\frac{e^2}{\Omega}\sum_{\vec{k}s}\frac{\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle}{\varepsilon_{\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar z}\cdot\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{i}{\hbar}\ll\varrho^+(\vec{q}),\varrho(\vec{q});z\gg$$

also mit der Abkürzung

$$\chi^0_{\varrho\varrho}(\vec{q}z)=-\frac{e^2}{\Omega}\sum_{\vec{k}s}\frac{\langle C^+(\vec{k}s)C(\vec{k}s)\rangle-\langle C^+(\vec{k}-\vec{q}s)C(\vec{k}-\vec{q}s)\rangle}{\varepsilon_{\vec{k}}-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}+\hbar z}\qquad(29.4)$$

für die "freie" Dichte-Korrelationsfunktion auf

$$\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{i}{\hbar}\ll\varrho^+(\vec{q}),\varrho(\vec{q});z\gg=\frac{\chi^0_{\varrho\varrho}(\vec{q}z)}{1+\frac{1}{q^2}\cdot\chi^0_{\varrho\varrho}(\vec{q}z)}.\qquad(29.5)$$

Das ist das bekannte RPA-Ergebnis. Es hat sich also auch in diesem Modell bestätigt, daß die transversale Wechselwirkung in RPA nichts zur Dichte-Korrelationsfunktion beiträgt

2. Multiplikation mit $e\,\delta^{T}_{\nu\sigma}(q)^{\hbar k'(\sigma)}/m$ und Summation über k',s' führt dagegen auf:

$$\{\varepsilon_{k}-\varepsilon_{k-q}+\hbar z\}\ll C^{+}(ks)C(k-qs),j^{ind.T}_{\nu}(q);z\gg$$
$$=\hbar/i\cdot e\,\delta_{\nu\sigma}(q)^{\hbar k(\sigma)}/m\{\langle C^{+}(k-qs)C(k-qs)\rangle-\langle C^{+}(ks)C(ks)\rangle\}$$
$$+1/\Omega\cdot e/\varepsilon(q)^{\hbar k(\sigma)}/m\{\langle C^{+}(k-qs)C(k-qs)\rangle-\langle C^{+}(ks)C(ks)\rangle\}\ll j^{ind.T}_{\sigma}(q)^{+},j^{ind.T}_{\nu}(q);z\gg.$$

Division durch $\{\varepsilon_{k}-\varepsilon_{k-q}+\hbar z\}$, Multiplikation mit $e\cdot 1/\hbar\cdot 1/\Omega\times$ $\times\,\delta^{T}_{\rho\varrho}(q)^{\hbar k(\varrho)}/m$ und Summation über k,s führen auf

$$\frac{1}{\Omega}\frac{i}{\hbar}\ll j^{ind.T}_{\rho}(q)^{+},j^{ind.T}_{\nu}(q);z\gg=-e^{2}\delta^{T}_{\rho\varrho}(q)\delta^{T}_{\nu\sigma}(q)\frac{1}{\Omega}\sum_{ks}\frac{\hbar k^{(\varrho)}\hbar k^{(\sigma)}}{m^{2}}\frac{\langle C^{+}(ks)C(ks)\rangle-\langle C^{+}(k-qs)C(k-qs)\rangle}{\varepsilon_{k}-\varepsilon_{k-q}+\hbar z}$$

$$-\frac{1}{\varepsilon(q)}\cdot e^{2}\delta^{T}_{\rho\varrho}(q)\frac{1}{\Omega}\sum_{ks}\frac{\hbar k^{(\varrho)}\hbar k^{(\sigma)}}{m^{2}}\frac{\langle C^{+}(ks)C(ks)\rangle-\langle C^{+}(k-qs)C(k-qs)\rangle}{\varepsilon_{k}-\varepsilon_{k-q}+\hbar z}\times$$

$$\times\frac{1}{\Omega}\frac{i}{\hbar}\ll j^{ind.T}_{\sigma}(q)^{+};j^{ind.T}_{\nu}(q);z\gg$$

Mit der Abkürzung (cf.Gl.28.9)

$$\chi^{oT}_{j_\rho j_\nu}(qz):=-\delta^{T}_{\rho\varrho}(q)\delta^{T}_{\nu\sigma}(q)\frac{e^{2}}{\Omega}\sum_{ks}\frac{\hbar k^{(\varrho)}\hbar k^{(\sigma)}}{m^{2}}\frac{\langle C^{+}(ks)C(ks)\rangle-\langle C^{+}(k-q)C(k-qs)\rangle}{\varepsilon_{k}-\varepsilon_{k-q}+\hbar z}\qquad(29.6)$$

für die "freie" Strom-Korrelationsfunktion schreibt sich diese Gl.:

$$\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{i}{\hbar}\ll j^{ind.T}_{\rho}(q)^{+},j^{ind.T}_{\nu}(q);z\gg=\chi^{oT}_{j_\rho j_\nu}(qz)+\frac{1}{\varepsilon(q)}\chi^{oT}_{j_\rho j_\sigma}(qz)\cdot\frac{1}{\Omega}\frac{i}{\hbar}\ll j^{ind.T}_{\sigma}(q)^{+},j^{ind.T}_{\nu}(q);z\gg$$

Wegen der Isotropie des Mediums gilt nun

$$\chi^{oT}_{j_\rho j_\nu}(qz)=\delta^{T}_{\rho\nu}(q)\,\chi^{oT}_{jj}(qz)$$
$$1/\Omega\cdot i/\hbar\ll j^{ind.T}_{\rho}(q)^{+},j^{ind.T}_{\nu}(q);z\gg=\delta^{T}_{\rho\nu}(q)\,\chi^{ind.T}_{jj}(qz)\qquad(29.7)$$

Es folgt durch Bildung der Spur der letzten Gl. und Division durch 2:

$$\chi^{ind.T}_{jj}(qz)=\chi^{oT}_{jj}(qz)+1/\varepsilon(q)\,\chi^{oT}_{jj}(qz)\,\chi^{ind.T}_{jj}(qz)$$

oder aufgelöst nach $\chi^{ind.T}_{jj}(qz)$:

$$\chi^{ind.T}_{jj}(qz)=\frac{\chi^{oT}_{jj}(qz)}{1-1/\varepsilon(q)\,\chi^{oT}_{jj}(qz)}\,.\qquad(29.8)$$

Der Vergleich mit Gl. (28.13) zeigt, daß

$$f(q) = c^2q^2 + \omega_p^2 \tag{29.9}$$

die richtige Wahl ist, um das analoge Ergebnis der 2-Komponenten-Theorie zu reproduzieren, so gut es in dem vereinfachten Modell möglich ist.

Die Bestimmung der restlichen Korrelationsfunktionen

$$\ll j_\mu^{id.}(q)^+, j_\nu^{ind.}(q); z \gg, \ll j_\mu^{ind.}(q)^+, j_\nu^{id.}(q); z \gg \text{ und } \ll j_\mu^{ind.}(q)^+, j_\nu^{ind.}(q); z \gg,$$

aus denen sich die volle Stromdichte-Korrelationsfunktion gemäß

$$\ll j_\mu(q)^+, j_\nu(q); z \gg = \ll j_\mu^{ind.}(q)^+, j_\nu^{ind.}(q); z \gg + \ll j_\mu^{id.}(q)^+, j_\nu^{ind.}(q); z \gg + \ll j_\mu^{ind.}(q)^+, j_\nu^{id.}(q); z \gg + \ll j_\mu^{id.}(q)^+, j_\nu^{id.}(q); z \gg$$

zusammensetzt, gestaltet sich einfach. Man betrachte z.B. die Korrelationsfunktion:

$$\ll j_\mu^{id.}(q)^+, j_\nu^{ind.}(q); z \gg = -\tfrac{1}{\Omega} \sum_{\bar{q}\neq 0} \tfrac{1}{(c^2\bar{q}^2+\omega_p^2)} \delta_{\mu\rho}^T(\bar{q})\, e^2/m \sum_{s_2 k_2} \ll C^+(k_2+\bar{q}+qs_2)\, j_\rho^{ind.}(\bar{q})\, C(k_2 s_2); j_\nu^{ind.}(q); z \gg$$

Konsequenterweise sollte diese 6-Punkt-Funktion wieder mit der obigen "Hartree-Faktorisation" genähert werden. Da der Erwartungswert des (nicht-diamagnetischen) Stromes verschwindet, folgt:

$$\ll j_\mu^{id.}(q)^+, j_\nu^{ind.}(q); z \gg = -\omega_p^2/(c^2q^2+\omega_p^2) \ll j_\mu^{ind.T}(q)^+; j_\nu^{ind.}(q); z \gg .$$

Ebenso (bzw. einfach wegen der Zeitumkehr-Invarianz) folgt

$$\ll j_\mu^{ind.}(q)^+, j_\nu^{id.}(q); z \gg = -\omega_p^2/(c^2q^2+\omega_p^2) \ll j_\mu^{ind.}(q)^+; j_\nu^{ind.T}(q); z \gg$$

und *)

$$\ll j_\mu^{id.}(q)^+, j_\nu^{id.}(q); z \gg = (\omega_p^2/(c^2q^2+\omega_p^2))^2 \ll j_\mu^{ind.T}(q)^+; j_\nu^{ind.T}(q); z \gg .$$

---

*) Es bleibe außer Betracht, daß dieser Beitrag von höherer Ordnung, nämlich von vierter Ordnung, in e/c ist (cf.p. 87 Fußnote).

Zusammenfassend erhält man:

$$\chi^{T}_{jj}(qz)-\omega_p^2 = \frac{\chi^{oT}_{jj}(qz)}{1-\chi^{oT}_{jj}(qz)/(c^2q^2+\omega_p^2)}\left\{1-2\frac{\omega_p^2}{c^2q^2+\omega_p^2}+\left(\frac{\omega_p^2}{c^2q^2+\omega_p^2}\right)^2\right\}-\omega_p^2$$

$$=\frac{1}{1-(\chi^{oT}_{jj}(qz)-\omega_p^2)/c^2q^2}\left\{\left(\frac{1}{1+\omega_p^2/c^2q^2}+\frac{\omega_p^2}{c^2q^2}\right)\chi^{oT}_{jj}(qz)-\left(1+\frac{\omega_p^2}{c^2q^2}\right)\omega_p^2\right\} \qquad (29.10)$$

Dies hat Ähnlichkeit mit Gl. (28.10), ist aber nicht das gleiche, selbst wenn man $-c^2q^2$ durch $z^2-c^2q^2$ (Retardierung!) ersetzt, wo es passend erscheint.

30. Ein näherungsunabhängiger Mangel des vereinfachten Modells

Man könnte zunächst glauben, das fehlerhafte Ergebnis sei eine Folge der benutzten Näherung (Hartree-Faktorisation!). Dagegen soll nun eine strenge Konsequenz aus dem vereinfachten, einkomponentigen Modell gezogen werden, die im Widerspruch steht zu allgemein akzeptierten Aussagen, die sich im Rahmen des zweikomponentigen Modells auch richtig reproduzieren lassen.

In Zusammenhang mit der longitudinalen Summenregel und Hochfrequenz-Näherung steht folgende Aussage:

$$[[H_o,\rho(q)]_-,\rho(q')^+]_- = [[T,\rho(q)]_-,\rho(q')^+]_- \qquad (30.1)$$

Dabei sei T der kinetische Energie-Operator für die Elektronen. Man prüft die Richtigkeit dieser Aussage leicht mit dem Hamilton-Operator (19.7) nach. Legt man dagegen dem Hamilton-Operator (29.1) des einkomponentigen Systems

zugrunde, ist diese Gl. verletzt. Denn es ist

(Kontinuitätsgl.!)

$$[[H_0,\varrho(q)]_-,\varrho(q')^+]_- = -\hbar q^{(\nu)}[j_\nu(q),\varrho(q')^+]_-$$
$$= -\hbar q^{(\nu)}\{e/m\,\varrho(q-q')\delta_{\mu\nu} - \tfrac{1}{2}\sum_{\tilde{q}\neq 0}\frac{1}{(c^2\tilde{q}^2+\omega_p^2)}\delta^T_{\mu\nu}(\tilde{q})e^2/m\sum_{ks}C^+(k+\tilde{q}s)e/m\,\varrho(\tilde{q}-q')C(k+qs)\}\cdot\hbar q'^{(\nu)} \qquad (30.2)$$

Dagegen ist

$$[[T,\varrho(q)]_-,\varrho(q')]_- = -\hbar q^{(\nu)}[j^{ind.}_\mu(q),\varrho(q')^+]_-$$
$$= -\hbar q^{(\nu)}\{e/m\,\varrho(q-q')\delta_{\mu\nu}\}\hbar q'^{\nu} \qquad (30.3)$$

Gemäß

$$\varrho(qt) = \varrho(q) + i/\hbar\, t\,[H_0,\varrho(q)]_- + \ldots.$$

würde Gl. (30.2) eine Hochfrequenz-Asymptotik

$$\chi_{\varrho\varrho} \equiv i/\hbar \ll\varrho(q),\varrho(q')^+;z\gg = -\int_0^\infty dt\, e^{izt}\, i/\hbar\,\langle[\varrho(qt),\varrho(q')^+]_-\rangle$$
$$= -1/\hbar^2\int_0^\infty dt\, e^{izt}\,t\cdot\langle[[H_0,\varrho(q)]_-,\varrho(q')^+]_-\rangle + O(z^{-3})$$
$$= \langle[[H_0,\varrho(q)]_-,\varrho(q')^+]_-\rangle/(\hbar z)^2 + O(z^{-3})$$

zur Folge haben, die um den Term

$$q^{(\nu)}\{\tfrac{1}{2}\sum_{\tilde{q}\neq 0}\frac{1}{(c^2\tilde{q}^2+\omega_p^2)}\delta^T_{\mu\nu}(\tilde{q})e^2/m\sum_{ks}\langle C^+(k+\tilde{q}s)e/m\,\varrho(\tilde{q}-q')C(k+qs)\rangle\}q'^{(\nu)}/z^2$$

von der richtigen Hochfrequenz-Näherung*)

$$\chi_{\varrho\varrho}(q,q';z) = i/\hbar \ll\varrho(q),\varrho(q')^+;z\gg \approx -q^{(\nu)}\omega_p^2(q,q')q'^{(\nu)}/z^2$$

abweicht. Nur in RPA für das homogene und isotrope Medium verschwindet offensichtlich der irrige zusätzliche Beitrag, so daß die Überlegungen einige Seiten vorher auf die richtige RPA-Ladungsdichte-Korrelationsfunktion führten.

Man kann die Ursache dieses Fehlers im Modell noch weiter verfolgen. Es mag die Feststellung genügen, daß der diamagnetische Teil der Stromdichte hier unzureichend beschrieben wird.

---

*) Die Richtigkeit dieser Hochfrequenz-Näherung erkennt man z.B. daran, daß allein aus der Kontinuitätsgl. folgende Beziehung zwischen den Ladungsdichte- und Stromdichte-Korrelationsfunktionen bestehen muß:

$$z^2\chi_{\varrho\varrho}(q,q';z) = q^{(\nu)}\{\chi_{j_\nu j_\mu}(q,q';z) - \omega_p^2(q,q')\}q'^{(\mu)}$$

VII. Das Modell der strikten ebenen Oberflächen

31. Bestimmung der Stromkorrelationsfunktionen

Ein weithin übliches Modell des Randes ist die strikte, für die Elektronen undurchdringliche Oberfläche. Es liegt allen Theorien, die mit einer lokalen D.K. $\varepsilon(z)$ operieren, ebenso zugrunde wie allen Berechnungen mit Hilfe der Boltzmann-Gl.[34 53] in Verbindung mit spiegelnder oder diffuser Reflexion der Partikel an der Oberfläche. Letztere können angesehen werden als semi-klassischer Grenzfall einer (quantenmechanischen) RPA für das zwischen unendlich hohe Potentialbarrieren eingeschlossene Elektronensystem vor dem positiven Hintergrund.[5 48 54]

Typisch sowohl für die Rechnungen mit der Boltzmann-Gl. als auch für die RPA bei Halbraum und Schicht ist der Trick, die jeweiligen Gln. "aus dem Grundgebiet fortzusetzen" und zwar durch periodische/anti-periodische Fortsetzung der auftretenden Funktionen mit der Periode der Schichtdicke a. Durchschlagenden Erfolg hat dieses Verfahren in der Boltzmann-Gleichungs-Behandlung mit spiegelnder Reflexion der Elektronen am Rande: Wie weiter unten ausgeführt, wird auf diese Weise ein homogenes Medium simuliert, und die Integralgln. entarten nach Fourier-Transformation zu algebraischen Gln. in den bulk-Leitfähigkeiten. Aber auch sonst ist es vorteilhaft, so zu verfahren.

Daher soll dieser Trick wieder auf Gl. (26.17) angewendet werden. Zur Vereinfachung soll in Zukunft angenommen werden, daß die betrachtete Schicht homogen in x_1- und x_2-Richtung

ist, so daß diese Gl. nach partieller Fourier-Transformation lautet (i=1,2):

$$Q^{(\mu\nu)}_{ioo}(q_i x'_3 x_3 z)^* = \tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioo}(q_i x'_3 x_3 z) + \int_0^a d\bar{x}_3 \int_0^a d\bar{x}'_3\, \tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{ioo}(q_i x'_3 \bar{x}_3 z)\, G^{o(\rho\sigma)}_{ioo}(q_i \bar{x}_3 \bar{x}'_3 z)\, Q^{(\sigma\nu)}_{ioo}(q_i \bar{x}'_3 x_3 z)^* \qquad (31.1)$$

Obwohl es nicht unbedingt notwendig ist, soll zur Vereinfachung noch angenommen werden, daß die Schicht bei $x_3=a/2$ eine Spiegelebene besitzt:

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioo}(x'_3 x_3) = g_{\mu\rho} g_{\nu\sigma} \tilde{Q}^{(\rho\sigma)}_{ioo}(a-x'_3\, a-x_3) \qquad (31.2)$$

und ähnlich für $Q'^{(\mu\nu)}_{ioo}(x'_3 x_3)^*$ und $G^{o(\mu\nu)}_{ioo}(x_3 x'_3)$. Dabei ist folgender Tensor:

$$g_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Ein statisches Magnetfeld werde also höchstens normal zur Schicht zugelassen. Dann separiert obige Gl. nach folgenden Anteilen:

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(x'_3 x_3) := \tfrac{1}{2}\{\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioo}(x'_3 x_3) \pm g_{\mu\rho} \tilde{Q}^{(\rho\nu)}_{ioo}(a-x'_3 x_3)\} \qquad \text{u.ä.} \qquad (31.3)$$

Für sie gilt

$$Q^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(x'_3 x_3)^* = \tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(x'_3 x_3) + \int_0^a d\bar{x}'_3 \int_0^a d\bar{x}_3\, \tilde{Q}^{(\mu\rho)}_{ioq/u}(x'_3 \bar{x}_3)\, G^{o(\rho\sigma)}_{ioq/u}(\bar{x}_3 \bar{x}'_3)\, Q^{(\sigma\nu)}_{ioq/u}(\bar{x}'_3 x_3) \qquad (31.4)$$

Durch periodische/anti-periodische Fortsetzung dieser q/u-Anteile gelangt man zu Funktionen $\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(x'_3 x_3)$ u.ä., die auf der ganzen x'_3- und x_3-Achse definiert sind. Sie lassen sich folglich durch eine Fourier-Reihe darstellen:

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(x'_3 x_3) = 1/a^2 \sum^{q/u}_{k'_3 k_3} e^{i k'_3 x'_3}\, \tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(k'_3 k_3)\, e^{-i k_3 x_3} \qquad (31.5)$$

Dabei deutet der Vermerk "q/u" an dem Summenzeichen an, daß je nach q- oder u-Anteil die Summation über k'_3, k_3 vom q-Typ ($k_3 = 2n\pi/a$) bzw. vom u-Typ ($k_3 = (2n+1)\pi/a$) erfolgt. In jedem Fall haben die Fourier-Komponenten wie $\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(k'_3 k_3)$ folgende Paritätseigenschaft:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(-k'_3 k_3) &= g_{\mu\rho}\, \tilde{Q}^{(\rho\nu)}_{ioq/u}(k'_3 k_3) \\ \tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{ioq/u}(k'_3 - k_3) &= \tilde{Q}^{(\rho\sigma)}_{ioq/u}(k'_3 k_3)\, g_{\sigma\nu} \end{aligned} \qquad (31.6)$$

Der Zusammenhang mit den Fourier-Komponenten der ursprünglichen Funktion ist:

$$\widehat{Q}^{(\mu\nu)}_{\omega g/u}(q_3 q_3) = \frac{1}{a^2}\sum_{k_3 k_3}{}^{g/u}\ \frac{1 \mp e^{-iq_3 a}}{q_3 - k_3}\ \widetilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\omega g/u}(k_3 k_3)\ \frac{1 \mp e^{iq_3 a}}{q_3 - k_3} \tag{31.7}$$

und ähnlich für die anderen Funktionen.

Damit erweist sich

$$Q^{(\mu\nu)}_{\omega g/u}(k_3 k_3)^* = \widetilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\omega g/u}(k_3' k_3) + 1/a^2 \sum_{k_3 \bar{k}_3}{}^{g/u}\ \widetilde{Q}^{(\mu\sigma)}_{\omega}(k_3' \bar{k}_3')\, \varrho^{o(\sigma\sigma)}_{\omega g/u}(\bar{k}_3 \bar{k}_3')\, Q^{(\sigma\nu)}_{\omega g/u}(\bar{k}_3' k_3)^* \tag{31.8}$$

als äquivalente Umformung der obigen Gl. Die "Lösbarkeit" dieser Gl. hängt an der einfachen Struktur von $\varrho^{o(\mu\nu)}_{\omega g/u}(k_3 k_3')$. Denn es ist *)

$$\begin{aligned}\varrho^{o(\mu\nu)}_{\omega g/u}(k_3 k_3') &= \int_0^\infty dx_3 \int_0^\infty dx_3'\, e^{-ik_3 x_3} e^{ik_3' x_3'}\, 1/L \sum_{q_3} G^{o(\mu\sigma)}_{\omega}(qz)\, 1/2 \{\delta_{\sigma\nu} e^{iq_3(x_3 - x_3')} \pm q_{\sigma\nu} e^{iq_3(x_3 + x_3' - a)}\} \\ &= \frac{1}{2L}\sum_{q_3} G^{o(\mu\nu)}_{\omega}(qz)\, \frac{1 \mp e^{-iq_3 a}}{q_3 - k_3}\, \frac{1 \mp e^{iq_3 a}}{q_3 - k_3'} + \frac{1}{2L}\sum_{q_3} G^{o(\mu\sigma)}_{\omega}(qz)\, \frac{1 \mp e^{iq_3 a}}{q_3 - k_3}\, \frac{1 \mp e^{-iq_3 a}}{q_3 + k_3'}\, q_{\sigma\nu}\end{aligned} \tag{31.9}$$

Nun ist nach Gl. (26.6) $G^{o(\mu\nu)}_{\omega}(qz) = \delta^L_{\mu\nu}(q)\,(c/z)^2 + \delta^T_{\mu\nu}(q)\, 1/(\lambda^2 - q_3^2)$ **)

oder ausführlich

$$G^{o(\mu\nu)}_{\omega}(qz) = (c/z)^2 (\lambda^2 - q_3^2)^{-1} \begin{bmatrix} (z/c)^2 - q_1^2 & -q_1 q_2 & -q_1 q_3 \\ -q_2 q_1 & (z/c)^2 - q_2^2 & -q_2 q_3 \\ -q_3 q_1 & -q_3 q_2 & (z/c)^2 - q_3^2 \end{bmatrix}, \tag{31.10}$$

so daß sich die Summationen nach Übergang zu Integralen mit Hilfe des Residuensatzes leicht auswerten lassen. Man erhält

$$\begin{aligned}\varrho^{o(\mu\nu)}_{\omega g/u}(k_3 k_3') = {} & a/2\,(\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3 - k_3'}) \cdot (c/z)^2 (\lambda^2 - k_3^2)^{-1} \begin{bmatrix} (z/c)^2 - q_1^2 & -q_1 q_2 & -q_1 k_3 \\ -q_2 q_1 & (z/c)^2 - q_2^2 & -q_2 k_3 \\ -k_3 q_1 & -k_3 q_2 & (z/c)^2 - k_3^2 \end{bmatrix} \\ & + (c\lambda/z)^2 \cdot (1 \mp e^{i\lambda a})/i\lambda \cdot 1/(\lambda^2 - k_3^2) \begin{bmatrix} (z/c)^2 - q_1^2 & -q_1 q_2 & -q_1 k_3' \\ -q_2 q_1 & (z/c)^2 - q_2^2 & -q_2 k_3' \\ -k_3 q_1 & -k_3 q_2 & k_3 q_3^2/\lambda^2 k_3' \end{bmatrix} \cdot 1/(\lambda^2 - k_3'^2)\end{aligned} \tag{31.11}$$

---

*) k_3, k_3' aus der durch den Index g/u angegebenen Klasse.

**) Der Longitudinal-Projektor ist $\delta^L_{\mu\nu}(q) := q_\mu q_\nu / q^2$, der Transversal-Projektor: $\delta^T_{\mu\nu}(q) := \delta_{\mu\nu} - \delta^L_{\mu\nu}(q)$.

Das Vorzeichen zwischen den beiden Kronecker-Symbolen ist so zu wählen, daß $\mathcal{G}^{d(\mu\nu)}_{10\,g|u}(k_3 k_3')$ die richtige Parität hat. Die "einfache Struktur" von $\mathcal{G}^{o(\mu\nu)}_{10}(k_3 k_3')$ besteht nun darin, daß der zweite Term in $\mathcal{G}^{o(\mu\nu)}_{10\,g|u}(k_3 k_3')$ ein zweidimensionaler Operator ist. Man verifiziert sofort, daß

$$\mathcal{G}^{o(\mu\nu)}_{10\,g|u}(k_3 k_3') = \tfrac{1}{2}(\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3 -k_3'})\, G^{o(\mu\nu)}_{10}(k_3) + (c/z)^2 (1 \mp e^{i\lambda a})/i\lambda \cdot p_\rho^{(\mu)}/(\lambda^2 - k_3^2)\cdot p_\rho^{\prime(\nu)}/(\lambda^2 - k_3'^2) + (1 \mp e^{i\lambda a})/i\lambda \cdot p_s^{(\mu)}/(\lambda^2 - k_3^2)\cdot p_s^{\prime(\nu)}/(\lambda^2 - k_3'^2), \qquad (31.12)$$

Dabei sind die Vektoren

$$p_\rho^{(\mu)} := (\lambda q_1/q_{11}, \lambda q_2/q_{11}, -k_3 q_1/\lambda) \text{ bzw. } p_\rho^{\prime(\mu)} := (\lambda q_1/q_{11}, \lambda q_2/q_{11}, -k_3' q_1/\lambda)$$
$$p_s^{(\mu)} \equiv p_s^{\prime(\mu)} := (-\lambda q_2/q_{11}, \lambda q_1/q_{11}, 0) \qquad (31.13)$$

eingeführt worden. Wegen folgender Eigenschaften

$$p_\rho^{(\mu)}\, p_s^{(\mu)} = 0$$
$$\bar{G}^{o}_{10(i\mu)}(k_3) p_\rho^{(\mu)} = p_\rho^{(\mu)} \bar{G}^{o}_{10(\mu i)}(k_3) = (z/c\lambda)^2 (\lambda^2 - k_3^2)\, p_\rho^{(i)}$$
$$\bar{G}^{o}_{10(3\mu)}(k_3) p_\rho^{(\mu)} = p_\rho^{(\mu)} \bar{G}^{o}_{10(\mu 3)}(k_3) = 0$$
$$\bar{G}^{o}_{10(\mu\nu)}(k_3) p_s^{(\nu)} = p_s^{(\nu)} \bar{G}^{o}_{10(\nu\mu)}(k_3) = (\lambda^2 - k_3^2)\, p_s^{(\mu)} \qquad (31.14)$$

sind sie nützlich für die im folgenden skizzierten Umformungen. Den Ausdruck (31.12) für $\mathcal{G}^{o(\mu\nu)}_{10\,g|u}(k_3 k_3')$ einsetzend erhält man die Gl.

$$\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\,g|u}(k_3' k_3)^* = \bar{\mathcal{Q}}^{(\mu\nu)}_{10\,g|u}(k_3' k_3) + \tfrac{1}{a}\tfrac{\overline{g|u}}{\bar{k}_3}\, \bar{\mathcal{Q}}^{(\mu\rho)}_{10\,g|u}(k_3' \bar{k}_3)\, G^{o(\rho\sigma)}_{10}(\bar{k}_3)\, \mathcal{Q}^{(\sigma\nu)}_{10\,g|u}(\bar{k}_3 k_3)^*$$
$$+ (c/z)^2 (1 \mp e^{i\lambda a})/i\lambda \cdot \tfrac{1}{a}\tfrac{\overline{g|u}}{\bar{k}_3}\, \bar{\mathcal{Q}}^{(\mu\rho)}_{10\,g|u}(k_3' \bar{k}_3)\, \bar{p}_\rho^{(\rho)}/(\lambda^2 - \bar{k}_3^2)\cdot \tfrac{1}{a}\tfrac{\overline{g|u}}{\bar{k}_3}\, \bar{p}_\rho^{\prime(\sigma)}/(\lambda^2 - \bar{k}_3^2)\, \mathcal{Q}^{(\sigma\nu)}_{10\,g|u}(\bar{k}_3 k_3)^*$$
$$+ (1 \mp e^{i\lambda a})/i\lambda \cdot \tfrac{1}{a}\tfrac{\overline{g|u}}{\bar{k}_3}\, \bar{\mathcal{Q}}^{(\mu\rho)}_{10\,g|u}(k_3' \bar{k}_3)\, \bar{p}_s^{(\rho)}/(\lambda^2 - \bar{k}_3^2)\cdot \tfrac{1}{a}\tfrac{\overline{g|u}}{\bar{k}_3}\, \bar{p}_s^{\prime(\sigma)}/(\lambda^2 - \bar{k}_3'^2)\, \mathcal{Q}^{(\sigma\nu)}_{10\,g|u}(\bar{k}_3 k_3)^* \qquad (31.15)$$

Mit Einführung der Inversen $\{\bar{G}^{o}_{10} - \mathcal{Q}^{g|u}_{10}\}^{-1}_{(\mu\nu)}(k_3 k_3')$ findet man auf direktem, aber etwas langwierigem Wege, daß

$$\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\,g|u}(k_3' k_3)^* = \tfrac{1}{a}\tfrac{\overline{g|u}}{\bar{k}_3}\, \bar{G}^{o(\rho\sigma)}_{10}(k_3')\{\bar{G}^{o}_{10} - \bar{\mathcal{Q}}^{g|u}_{10}\}^{-1}_{(\rho\sigma)}(k_3' \bar{k}_3)\, \bar{\mathcal{Q}}^{(\sigma\nu)}_{10\,g|u}(\bar{k}_3 k_3)$$
$$- \tfrac{1}{a^2}\sum_{\bar{k}_3 \bar{k}_3}\, \bar{\mathcal{Q}}^{(\rho\sigma)}_{10\,g|u}(k_3' \bar{k}_3)\{\bar{G}^{o}_{10} - \bar{\mathcal{Q}}^{g|u}_{10}\}^{-1}_{(\sigma i)}(\bar{k}_3 \bar{k}_3')\cdot 2i\lambda(z/c\lambda)\cdot\{(c/z + Z^{\rho\rho}_{g|u})(z/c\lambda + Z^{ss}_{g|u}) - Z^{\rho s}_{g|u} Z^{s\rho}_{g|u}\}^{-1}\cdot$$
$$\cdot\{(z/c\lambda + Z^{ss}_{g|u}) q_i q_j/q_{11}^2 + Z^{\rho s}_{g|u}\, q_i q_j^s/q_{11}^2 + Z^{s\rho}_{g|u}\, q_i^s q_j/q_{11}^2 + (c/z + Z^{\rho\rho}_{g|u}) q_i^s q_j^s/q_{11}^2\}\cdot$$
$$\cdot\, \tfrac{1}{a^2}\tfrac{\overline{g|u}}{\bar{k}_3 \bar{k}_3}\{\bar{G}^{o}_{10} - \bar{\mathcal{Q}}^{g|u}_{10}\}^{-1}_{(j\sigma)}(\bar{k}_3 \bar{k}_3')\, \bar{\mathcal{Q}}^{(\sigma\nu)}_{10\,g|u}(\bar{k}_3' k_3) \qquad (31.16)$$

diese Gl. löst.*) Dabei sind folgende Abkürzungen eingeführt:

$$Z^{pp}_{q|u} := 2iz/c\; q_i/q_u\,(1/a^2 \sum^{q|u}_{k_3 k_3'} \{\tilde{G}^{-1}_{\mu 0} - \tilde{Q}^{q|u}_{\mu 0}\}^{-1}_{(ij)}(k_3 k_3'))\, q_i/q_u$$

$$Z^{ps}_{q|u} := -2iz/c\; q_i/q_u\,(1/a^2 \sum^{q|u}_{k_3 k_3'} \{\tilde{G}^{-1}_{\mu 0} - \tilde{Q}^{q|u}_{\mu 0}\}^{-1}_{(ij)}(k_3 k_3'))\, q^s_i/q_u$$

$$Z^{sp}_{q|u} := -2iz/c\; q^s_i/q_u\,(1/a^2 \sum^{q|u}_{k_3 k_3'} \{\tilde{G}^{-1}_{\mu 0} - \tilde{Q}^{q|u}_{\mu 0}\}^{-1}_{(ij)}(k_3 k_3'))\, q_i/q_u$$

$$Z^{ss}_{q|u} := 2iz/c\; q^s_i/q_u\,(1/a^2 \sum^{q|u}_{k_3 k_3'} \{\tilde{G}^{-1}_{\mu 0} - \tilde{Q}^{q|u}_{\mu 0}\}^{-1}_{(ij)}(k_3 k_3'))\, q^s_i/q_u \qquad (31.17a\text{-}d)$$

Tatsächlich wird es sich erweisen, daß diese Größen mit den Oberflächen-Impedanzen nach Gl. (11.13) übereinstimmen, so daß die Wahl des Symbols gerechtfertigt ist (s.w.u.).

Das Problem, die Stromkorrelationsfunktionen (also i.w. $\tilde{Q}^{*}_{\mu\mu}$) aus den Leitfähigkeiten (i.w. $\tilde{Q}_{\mu 0}$) zu bestimmen, ist zurückgeführt auf das Problem, $\{\tilde{G}^{-1}_{\mu 0} - \tilde{Q}^{q|u}_{\mu 0}\}^{-1}$ zu bestimmen.

Das letztere Problem wird trivial lösbar in der Boltzmann-Gleichungs-Näherung mit der Randbedingung spiegelnder Reflexion für die Elektronen (p=1)**) und einem kastenförmigen (bzw. im Halbraum-Fall: stufenförmigen) Profil der Gleichgewichts-Elektronendichte. Es ist bekannt,[33 34 35] daß in diesem Fall die Fourier-Komponenten der $q|u$ -Anteile der Leitfähigkeiten "quasi-diagonal" sind, in der hier gewählten Schreibweise also:

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\mu 0\, q|u}(k_3 k_3') = \tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\mu 0}(k_3) \cdot a/2 \{\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3 - k_3'}\} \qquad (31.18)$$

Dabei sind die $\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\mu 0}(k_3)$ die (bis auf Konstanten) Leitfähigkeiten, wie sie sich aus der Boltzmann-Gl. für das unbegrenzte Medium ergeben.

---

*) Das zeigt am schnellsten die Probe durch Einsetzen.

**) Wegen der Existenz von "skipping electrons" nach Prange u. Nee[13] und aufgrund der Messungen von Van de Klundert et al.[36] an monokristallinen Sn-Zylindern erscheint diese

Umgekehrt werden sehr häufig in der Literatur Anomaler-Skin-Effekt-Probleme (z.B.37 38) oder das Problem des Meißner-Effekts[39] so gelöst, daß zunächst die "Leitfähigkeit" $\tilde{\mathcal{Q}}^{(\mu\nu)}_{\infty}$ des unendlichen Mediums (quantenmechanisch) berechnet wird und dann Gl. (31.18) als Lösung desselben Problems für die Schicht postuliert wird. Offensichtlich verlangt diese Behandlung, daß die de Broglie-Wellenlänge gegenüber der Skintiefe vernachlässigbar ist. Van Gelder[40] hat für ein freies Elektronengas hoher Dichte gezeigt, daß dies zulässig ist für Frequenzen $\omega < 10^{6}\,s^{-1}$, und für einen Frequenzbereich $10^{6}s^{-1} < \omega < 10^{14}s^{-1}$ quantenmechanische Korrekturen in Abhängigkeit von dem Verhältnis beider Längen angegeben, die je nach Reinheit des Materials bis zu 10 % ausmachen würden.

Dann folgt:

$$\{\tilde{G}^{o}_{\infty} - \tilde{\mathcal{Q}}^{g/u}_{\infty}\}^{-1}_{(\mu\nu)}(k_3 k_3') = (\{\tilde{G}^{o}_{\infty}(k_3) - \tilde{\mathcal{Q}}_{\infty}(k_3)\}^{-1})_{(\mu\nu)}\, a/2\,\{\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3 - k_3'}\} \qquad (31.19)$$

Es ist also nur mehr eine Matrix-Invertierung durchzuführen.

Es folgt weiter:*)

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{Q}}^{(\mu\nu)}_{\infty\, g/u}(k_3 k_3')^{*} = {} & \tilde{G}^{o}_{\infty(\mu\rho)}(k_3)/(\{\tilde{G}^{o}_{\infty}(k_3) - \tilde{\mathcal{Q}}_{\infty}(k_3)\}^{-1})_{(\rho\sigma)}\,\tilde{\mathcal{Q}}^{(\sigma\nu)}_{\infty}(k_3')\cdot a/2\{\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3 - k_3'}\} \\ & - \tilde{\mathcal{Q}}^{(\mu\rho)}_{\infty}(k_3)(\{\tilde{G}^{o}_{\infty}(k_3) - \tilde{\mathcal{Q}}_{\infty}(k_3)\}^{-1})_{(\rho i)}\cdot 2i\lambda(z/c\lambda)\{(c\lambda/z + Z^{pp}_{g/u}(q_\infty z))(z/c\lambda + Z^{ss}_{g/u}) - Z^{sp}_{g/u} Z^{sp}_{g/u}\}^{-1}\cdot \\ & \cdot\{(z/c\lambda + Z^{ss}_{g/u})q_i q_j/q_\infty^2 + Z^{ps}_{g/u} q_i q_\infty^{s}/q_\infty^2 + Z^{sp}_{g/u} q_\infty^{s} q_j/q_\infty^2 + (c\lambda/z + Z^{pp}_{g/u}) q_\infty^{s} q_\infty^{s}/q_\infty^2\} \\ & \cdot(\{\tilde{G}^{o}_{\infty}(k_3') - \tilde{\mathcal{Q}}_{\infty}(k_3')\}^{-1})_{(j\sigma)}\,\tilde{\mathcal{Q}}^{(\sigma\nu)}_{\infty}(k_3') \qquad (31.20)\end{aligned}$$

---

der Randbedingung p=0 überlegen.

*) Wie oben definiert, sind die $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\infty\, g/u}(k_3 k_3')^{*}$ die Fourier-Komponenten der (g/u-Teile der periodisch/anti-periodisch fortgesetzten) Stromdichte-Korrelationsfunktionen (bis auf Konstanten). Anwendung der Kontinuitätsgl. - longidinale Summenregel - (26.15) führt auf eine (periodisch/anti-periodisch fortgesetzte) Ladungsdichte-Korrelations-

und

$$Z^{pp}_{q_\mu} = 2iz/c \cdot q_i/q_\mu \; 1/a \sum_{k_3} \frac{q_\mu}{k_3} (\{\tilde{G}^{\circ}_{10}(k_3) - \tilde{Q}_{10}(k_3)\}^{-1})_{ij} q_i/q_\mu$$

$$Z^{ps}_{q_\mu} = -2iz/c \cdot q_i/q_\mu \; 1/a \sum_{k_3} \frac{q_\mu}{k_3} (\{\tilde{G}^{\circ}_{10}(k_3) - \tilde{Q}_{10}(k_3)\}^{-1})_{ij} q^s_i/q_\mu$$

$$Z^{sp}_{q_\mu} = -2iz/c \cdot q^s_i/q_\mu \; 1/a \sum_{k_3} \frac{q_\mu}{k_3} (\{\tilde{G}^{\circ}_{10}(k_3) - \tilde{Q}_{10}(k_3)\}^{-1})_{ij} q_i/q_\mu$$

$$Z^{ss}_{q_\mu} = 2iz/c \cdot q^s_i/q_\mu \; 1/a \sum_{k_3} (\{\tilde{G}^{\circ}_{10}(k_3) - \tilde{Q}_{10}(k_3)\}^{-1})_{ij} q^s_i/q_\mu \qquad (31.21a\text{-}d)$$

32. Bestimmung der RTK

Aus den $Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3' q_3)$ bestimmen sich gemäß Gl. (8.2a-p) die RTK. Im einzelnen ist (bei Vorliegen einer Spiegelebene $x_3 = a/2$):

$$Q^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z) = 1/2 i\lambda (c\lambda/2)^2 \{q_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_j/q_\mu - q_i/q_\mu Q^{(i3)}_{10}(-\lambda\lambda) + q_3/\lambda Q^{(3j)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_j/q_\mu - q_3/\lambda Q^{(33)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_3/\lambda\}$$

$$Q^{ps}_{(i)}(q_1 q_2 z) = 1/2 i\lambda (c\lambda/2)^2 \{q_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q^s_j/q_\mu + q_3/\lambda Q^{(3j)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q^s_j/q_\mu\}$$

$$Q^{sp}_{(i)}(q_1 q_2 z) = 1/2 i\lambda \{q^s_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_j/q_\mu - q^s_i/q_\mu Q^{(i3)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_3/\lambda\}$$

$$Q^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z) = 1/2 i\lambda \{q^s_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q^s_j/q_\mu\}$$

$$T^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z) = e^{i\lambda a}(1 + 1/2 i\lambda (c\lambda/2)^2 \{q_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_j/q_\mu - q_i/q_\mu Q^{(i3)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_3/\lambda - q_3/\lambda Q^{(3j)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_j/q_\mu - q_3/\lambda Q^{(33)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_3/\lambda\})$$

$$T^{ps}_{(i)}(q_1 q_2 z) = e^{i\lambda a} \cdot 1/2 i\lambda (c\lambda/2)^2 \{q_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q^s_j/q_\mu - q_3/\lambda Q^{(3j)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q^s_j/q_\mu\}$$

$$T^{sp}_{(i)}(q_1 q_2 z) = e^{i\lambda a} \cdot 1/2 i\lambda \{q^s_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_j/q_\mu - q^s_i/q_\mu Q^{(i3)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q_3/\lambda\}$$

$$T^{ss}_{(i)}(q_1 q_2 z) = e^{i\lambda a}(1 + 1/2 i\lambda \{q^s_i/q_\mu Q^{(ij)}_{10}(-\lambda\lambda)^* q^s_j/q_\mu\}) \qquad (32.1a\text{-}h)$$

---

funktion, die sich als identisch mit der von Griffin und Zaremba[41] ebenfalls aus der Boltzmann-Gl. abgeleiteten Korrelationsfunktion erweist, wenn man die Retardierung vernachlässigt ($c \to \infty$) und - entsprechend der Symmetrie - die pseudo-skalaren Größen gleich Null setzt.

Speziell im obigen Modell lassen sie sich mit Hilfe von $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*$ und den Vektoren $p_p^{(r)}$, $p_s^{(r)}$ formulieren:

$$\mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_1 q_2 z) = -\frac{1}{2i\lambda}\left(\frac{c\lambda}{z}\right)^2\left\{\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{q\\ k_3' k_3}}\frac{p_p^{\prime(r)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}+\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{u\\ k_3' k_3}}\frac{p_p^{\prime(r)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}\right\}$$

$$\mathcal{R}^{sq}_{(i)}(q_1 q_2 z) = -\frac{1}{2i\lambda}\left\{\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{q\\ k_3' k_3}}\frac{p_s^{\prime(r)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}+\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{u\\ k_3' k_3}}\frac{p_s^{\prime(r)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}\right\}$$

$$\mathcal{T}^{pq}_{(i)}(q_1 q_2 z) = e^{i\lambda a}-\frac{1}{2i\lambda}\left(\frac{c\lambda}{z}\right)^2\left\{\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{q\\ k_3' k_3}}\frac{p_p^{\prime(r)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}-\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{u\\ k_3' k_3}}\frac{p_p^{\prime(r)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}\right\}$$

$$\mathcal{T}^{sq}_{(i)}(q_1 q_2 z) = e^{i\lambda a}-\frac{1}{2i\lambda}\left\{\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{q\\ k_3' k_3}}\frac{p_s^{\prime(r)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1-e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}-\frac{1}{a^2}\sum_{\substack{u\\ k_3' k_3}}\frac{p_s^{\prime(r)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3'^2}\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\frac{p_{rs}^{(\nu)}(1+e^{i\lambda a})}{\lambda^2-k_3^2}\right\}$$

(32.2a-d)

N.B.: Für die "außerdiagonalen" $\mathcal{T}^{ps}_{(i)}$ und $\mathcal{T}^{sp}_{(i)}$ ist der Summand $e^{i\lambda a}$ zu streichen.

Zu ihrer Auswertung bestimmt man zunächst aus $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*$ gemäß Gl. (31.16) oder einfacher direkt aus der Gl. (31.15) die Größe:

$$\begin{bmatrix}(1\mp e^{i\lambda a})/a\sum_{k_3'}^{q l_u} p_p^{\prime(r)}/(\lambda^2-k_3'^2)\,\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\\ (1\mp e^{i\lambda a})/a\sum_{k_3'}^{q l_u} p_s^{\prime(r)}/(\lambda^2-k_3'^2)\,\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(k_3' k_3)^*\end{bmatrix} = 2\lambda(z/c\lambda)\left\{(c\lambda/z+Z^{pp}_{q l_u})(z/c\lambda+Z^{ss}_{q l_u})-Z^{ps}_{q l_u}Z^{sp}_{q l_u}\right\}^{-1}\begin{bmatrix} z/c\lambda+Z^{ss}_{q l_u} & Z^{ps}_{q l_u}\\ Z^{sp}_{q l_u} & c\lambda/z+Z^{pp}_{q l_u}\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} q_i/q_u\\ q_i^s/q_u\end{bmatrix} 1/a^2\sum_{\substack{q l_u\\ k_3 k_3'}}\left\{\tilde{G}^{\prime\,o}_{\kappa_0}-\tilde{\mathcal{Q}}^{q l_u}_{\kappa_0}\right\}^{-1}_{(i\rho)}(\bar{k}_3\bar{k}_3')\,\tilde{\mathcal{Q}}^{(\rho\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(\bar{k}_3' k_3)$$

Darauf bestimmt man

$$\begin{bmatrix}(1\mp e^{i\lambda a})/a^3\sum_{\substack{q l_u\\ k_3 k_3' k_3}}\left\{\tilde{G}^{\prime\,o}_{\kappa_0}-\tilde{\mathcal{Q}}^{q l_u}_{\kappa_0}\right\}^{-1}_{(i\rho)}(\bar{k}_3\bar{k}_3')\,\tilde{\mathcal{Q}}^{(\rho\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(\bar{k}_3' k_3')\,p_o^{(\nu)}/(\lambda^2-k_3^2)\\ (1\mp e^{i\lambda a})/a^3\sum_{\substack{q l_u\\ k_3 k_3' k_3}}\left\{\tilde{G}^{\prime\,o}_{\kappa_0}-\tilde{\mathcal{Q}}^{q l_u}_{\kappa_0}\right\}^{-1}_{(i\rho)}(\bar{k}_3\bar{k}_3')\,\tilde{\mathcal{Q}}^{(\rho\nu)}_{\kappa_0 q l_u}(\bar{k}_3' k_3)\,p_s^{(\nu)}/(\lambda^2-k_3^2)\end{bmatrix}$$

$$= 1/2i\begin{bmatrix}-(1\pm e^{i\lambda a})+(1\mp e^{i\lambda a})z/c\lambda\,Z^{pp}_{q l_u} & -(1\mp e^{i\lambda a})z/c\lambda\cdot Z^{sp}_{q l_u}\\ -(1\mp e^{i\lambda a})\cdot c\lambda/z\cdot Z^{ps}_{q l_u} & -(1\pm e^{i\lambda a})+(1\mp e^{i\lambda a})c\lambda/z\,Z^{ss}_{q l_u}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} q_i/q_u\\ q_i^s/q_u\end{bmatrix}.$$

Damit folgt offensichtlich

$$\begin{bmatrix} \mathcal{R}^{pp}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{pp}_{(i)} \mp e^{i\lambda a} & \mathcal{R}^{ps}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{ps}_{(i)} \\ \mathcal{R}^{sp}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{sp}_{(i)} & \mathcal{R}^{ss}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{ss}_{(i)} \mp e^{i\lambda a} \end{bmatrix} = -(z/c\lambda)\{(c\lambda/z + Z^{pp}_{g/m})(z/c\lambda + Z^{ss}_{g/m}) - Z^{ps}_{g/m} Z^{sp}_{g/m}\}^{-1} \cdot$$

$$\cdot \begin{bmatrix} (c\lambda/z)^2 (z/c\lambda + Z^{ss}_{g/m}) & (c\lambda/z)^2 Z^{ps}_{g/m} \\ Z^{sp}_{g/m} & c\lambda/z + Z^{pp}_{g/m} \end{bmatrix} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \begin{bmatrix} 1 - z/c\lambda\, Z^{pp}_{g/m} & c\lambda/z\, Z^{ps}_{g/m} \\ z/c\lambda\, Z^{sp}_{g/m} & 1 - c\lambda/z\, Z^{ss}_{g/m} \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} 1 + z/c\lambda\, Z^{pp}_{g/m} & -c\lambda/z\, Z^{ps}_{g/m} \\ -z/c\lambda\, Z^{sp}_{g/m} & 1 + c\lambda/z\, Z^{ss}_{g/m} \end{bmatrix} e^{i\lambda a} \right\}$$

und, da sich die Beiträge $\propto e^{i\lambda a}$ rechts und links aufheben, folgt:

$$\begin{bmatrix} \mathcal{R}^{pp}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{pp}_{(i)} & \mathcal{R}^{ps}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{ps}_{(i)} \\ \mathcal{R}^{sp}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{sp}_{(i)} & \mathcal{R}^{ss}_{(i)} \pm \mathcal{T}^{ss}_{(i)} \end{bmatrix} = \frac{-1}{\{(c\lambda/z + Z^{pp}_{g/m})(z/c\lambda + Z^{ss}_{g/m}) - Z^{ps}_{g/m} Z^{sp}_{g/m}\}} \cdot$$

$$\cdot \begin{bmatrix} c\lambda/z\,(z/c\lambda + Z^{ss}_{g/m}) & c\lambda/z\, Z^{ps}_{g/m} \\ z/c\lambda\, Z^{sp}_{g/m} & z/c\lambda\,(c\lambda/z + Z^{pp}_{g/m}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z/c\lambda\,(c\lambda/z - Z^{pp}_{g/m}) & -c\lambda/z\, Z^{ps}_{g/m} \\ -z/c\lambda\, Z^{sp}_{g/m} & c\lambda/z\,(z/c\lambda - Z^{ss}_{g/m}) \end{bmatrix} \quad (32.3)$$

Auflösung dieser Gl. nach den $Z^{pp}_{g/m}$, $Z^{ps}_{g/m}$ usw. und Vergleich mit Gl. (11.13) zeigt, daß diese in (31.17) eingeführten Abkürzungen mit den früher definierten Oberflächen-Impedanzen (mit der Wahl $\eta_p = \eta_s = \pm 1$) identisch sind. Im Rahmen des Modells der scharfen Oberflächen erscheinen diese gegenüber den RTK so auf einmal als die primären Größen.

33. Diskussion der Ergebnisse

Zunächst erkennt man, daß gemäß Gl. (31.16) $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\,g/m}(k_3 k_3)^*$ bzw. in Ortsdarstellung $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\,g/m}(x_3 x_3)^*$ in zwei Anteile zerfällt, die bez. ihrer Abhängigkeit von x_3', x_3 von sehr unterschiedlichem Charakter sind. Die Abhängigkeit des ersten

Terms von x_3', x_3 ist wesentlich bestimmt durch (das relativ lokalisierte) $\mathfrak{J}^{(\mu\nu)}_{10\,g/m}(x_3 x_3')$, es ist eine Abhängigkeit von $x_3 - x_3'$ und (schwächer) von $1/2(x_3 + x_3')$. Der zweite Term ist ein eindimensionaler Operator: er zerfällt in ein Produkt von zwei Funktionen, die jeweils nur von x_3' bzw. von x_3 abhängen. Mit anderen Worten: dieser Term hängt nur ab von den Abständen der Argumente x_3', x_3 von den Oberflächen. Diese durch die Oberflächen vermittelte Korrelation zwischen den Stromdichten ist gewichtet mit dem Faktor

$$\{(c\lambda/z + Z^{pp}_{g/m})(z/c\lambda + Z^{ss}_{g/m}) - Z^{ps}_{g/m} Z^{sp}_{g/m}\}^{-1}. \tag{33.1}$$

Die Pole dieses allen RTK gemeinsamen Faktors bestimmen aber die Polaritonen der Schicht (Oberflächen-Polaritonen). Diese Pole sind allen RTK gemeinsam, solange nicht - zufällig oder aus Symmetrie-Gründen - ein Pol von (33.1) durch eine Nullstelle der restlichen Faktoren in einem Reflexions- oder Transmissionskoeffizienten aufgehoben wird (cf.p.57).

Der unterschiedliche Charakter der beiden Anteile von tritt besonders klar hervor in der (quasi-) diagonalen (Boltzmann-) Näherung für $\tilde{\mathfrak{J}}^{(\mu\nu)}_{10\,g/m}(k_3 k_3')$, Gl. (31.18), also in Gl. (31.20): Hier beschreibt der erste Term die Optik eines durch $\mathfrak{J}^{(\mu\nu)}_{10}(qz)$ (d.h. im wesentlichen die Leitfähigkeit) beschriebenen homogenen, aber anisotropen Mediums*) und zwar mit Berücksichtigung auch der räumlichen Dispersion (optische Aktivität etc.). Sein Nenner, nämlich die Determinante von $\{\bar{G}^{-1\,0\,(\mu\nu)}_{10}(k_3) - \tilde{\mathfrak{J}}^{(\mu\nu)}_{10}(k_3)\}$, gleich Null gesetzt ist die entsprechende Verallgemeinerung der Fresnelschen Normalengl. Der Einfluß der Oberflächen erscheint im zweiten Term.

---

*) Allerdings schränkt die zur Vereinfachung der Gl. (31.1) geforderte Spiegelebene bei $x_3 = a/2$ die Allgemeinheit ziemlich ein: nicht-trikline Kristallsymmetrie, Platte normal

Gl. (32.2) ist eine kompakte Formulierung der komplizierten Reflexions- und Transmissionserscheinungen an aus solchem Material herausgeschnittenen Platten. Die Wurzeln von

$$(c\lambda/z + Z^{pp}_{g/m})(z/c\lambda + Z^{ss}_{g/m}) - Z^{ps}_{g/m} Z^{sp}_{g/m} = 0 \qquad (33.2)$$

bestimmen die Polaritonen der Schicht (Oberflächen-Polaritonen) aus solchem anisotropen Material. Sie haben in letzter Zeit vermehrtes Interesse gefunden und zwar sowohl für "natürlich"[42] wie für "künstlich"[43] - d.h. durch ein angelegtes statisches B-Feld*) - anisotrope Medien. Allerdings scheint man sich bisher mit der einfachsten Näherung einer lokalen D.K., in der hier gewählten Schreibweise also eines $\tilde{\varepsilon}^{(\mu\nu)}_{10}(z)$ in Gl. (31.18), begnügt zu haben (s.w.u.).

34. Auswertungen und Vergleiche

Mit der Hinzunahme von mehr und mehr Symmetrie-Elementen vereinfachen sich die verschiedenen Ausdrücke. Am häufigsten betrachtet ist die Jellium-Schicht ohne Anwendung eies Magnetfeldes. Aufgrund der oben (p.52) diskutierten Symmetrien dieses Systems verschwinden alle pseudo-skalaren Größen; $\tilde{\varepsilon}^{(\mu\nu)}_{10\,g/m}(k_s k'_s)$ hat die Gestalt:

---

zu einer ausgezeichneten Achse geschnitten, statisches B-Feld höchstens normal zur Schicht angelegt.

$$\tilde{\mathcal{G}}^{(ij)}_{z0\,glu}(q_\parallel q_{\parallel 2} k_3' k_3 z) = q_i q_j / q_\parallel^2 \; \tilde{\mathcal{G}}^{(pp)}_{z0\,glu}(q_\parallel k_3' k_3 z) + q_i^s q_j^s / q_\parallel^2 \; \tilde{\mathcal{G}}^{(ss)}_{z0\,glu}(q_\parallel k_3' k_3 z)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}^{(i3)}_{z0\,glu}(q_\parallel q_{\parallel 2} k_3' k_3 z) = q_i / q_\parallel \; \tilde{\mathcal{G}}^{(p3)}_{z0\,glu}(q_\parallel k_3' k_3 z)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}^{(3j)}_{z0\,glu}(q_\parallel q_{\parallel 2} k_3' k_3 z) = \tilde{\mathcal{G}}^{(3p)}_{z0\,glu}(q_\parallel k_3' k_3 z) \, q_j / q_\parallel$$

$$\tilde{\mathcal{G}}^{(33)}_{z0\,glu}(q_\parallel q_{\parallel 2} k_3' k_3 z) = \tilde{\mathcal{G}}^{(33)}_{z0\,glu}(q_\parallel k_3' k_3 z) \; , \qquad (34.1)$$

so daß die beiden Projektoren*) $\delta^p_{\mu\nu}(q_i)$ und $\delta^s_{\mu\nu}(q_i)$ den Operator $\tilde{\mathcal{G}}^{(\mu\nu)}_{z0\,glu}$ reduzieren:

$$\tilde{\mathcal{G}}^{p(\mu\nu)}_{z0\,glu}(k_3' k_3) := \delta^p_{\mu\rho}(q_i) \, \tilde{\mathcal{G}}^{(\rho\nu)}_{z0\,glu}(k_3' k_3) = \tilde{\mathcal{G}}^{(p\rho)}_{z0\,glu}(k_3' k_3) \, \delta^p_{\rho\nu}(q_i) \qquad (34.2a)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}^{s(\mu\nu)}_{z0\,glu}(k_3' k_3) := \delta^s_{\mu\rho}(q_i) \, \tilde{\mathcal{G}}^{(\rho\nu)}_{z0\,glu}(k_3' k_3) = \tilde{\mathcal{G}}^{(p\rho)}_{z0\,glu}(k_3' k_3) \, \delta^s_{\rho\nu}(q_i) \qquad (34.2b)$$

$$= \delta^s_{\mu\nu}(q_i) \, \tilde{\mathcal{G}}^{(ss)}_{z0\,glu}(k_3' k_3)$$

Analoges ist offenbar für die anderen Größen möglich.

Speziell ist:

$$\tilde{\mathcal{G}}^{-1\,op}_{z0(\mu\nu)}(q_i k_3 z) = \begin{bmatrix} (z^2/c^2 - k_3^2) q_1 q_1 / q_\parallel^2 & (z^2/c^2 - k_3^2) q_1 q_2 / q_\parallel^2 & q_1 k_3 \\ (z^2/c^2 - k_3^2) q_2 q_1 / q_\parallel^2 & (z^2/c^2 - k_3^2) q_2 q_1 / q_\parallel^2 & q_2 k_3 \\ k_3 q_1 & k_3 q_2 & \lambda^2 \end{bmatrix} \qquad (34.3a)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}^{-1\,os}_{z0(\mu\nu)}(q_i k_3 z) = (z^2/c^2 - q_\parallel^2 - k_3^2) \, \delta^s_{\mu\nu}(q_i) \; . \qquad (34.3b)$$

a) Die Dispersion der P-polarisierten Polaritonen der Schicht ist wegen des Verschwindens der Pseudo-Skalare Z^{ps}_{glu} und Z^{sp}_{glu} gegeben durch

$$c^2/z + Z^{pp}_{glu}(q_\parallel z) = 0 \qquad (34.4)$$

Dabei ist

$$Z^{pp}_{glu}(q_\parallel z) = 2i z/c \cdot q_i / q_\parallel \, (1/a^2 \sum_{k_3' k_3} \{ \tilde{\mathcal{G}}^{-1\,o}_{z0} - \tilde{\mathcal{G}}^{glu}_{z0} \}^{-1}_{(ij)}(k_3' k_3)) \, q_j / q_\parallel \qquad (34.5)$$

oder aufgrund der vorhergehenden Überlegungen auch

$$Z^{pp}_{glu}(q_\parallel z) = 2i z/c \cdot q_i / q_\parallel \, (1/a^2 \sum_{k_3' k_3} \{ \tilde{\mathcal{G}}^{-1\,op}_{z0} - \tilde{\mathcal{G}}^{p}_{z0\,glu} \}^{-1}_{(ij)}(k_3' k_3)) \, q_j / q_\parallel \qquad (34.6)$$

---

*)

$$\delta^p_{\mu\nu}(q_i) := \begin{bmatrix} q_1 q_1 / q_\parallel^2 & q_1 q_2 / q_\parallel^2 & 0 \\ q_1 q_2 / q_\parallel^2 & q_2 q_1 / q_\parallel^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \delta^s_{\mu\nu}(q_i) := \begin{bmatrix} q_2 q_2 / q_\parallel^2 & -q_2 q_1 / q_\parallel^2 & 0 \\ q_1 q_2 / q_\parallel^2 & q_1 q_1 / q_\parallel^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix};$$

$$\delta^p_{\mu\nu}(q_i) + \delta^s_{\mu\nu}(q_i) = \delta_{\mu\nu} \qquad (34.2'a\text{-}b)$$

In der oben beschriebenen Boltzmann-Näherung gilt für die feldfreie Jellium-Schicht nicht nur

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\infty\, q_\parallel}(q_\parallel k_3 k_3' z) = \tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\infty}(q_\parallel k_3 z)\cdot a/2\,\{\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3,-k_3'}\}, \tag{34.7}$$

jetzt gilt sogar

$$\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\infty}(q_\parallel k_3 z) = \tilde{Q}^{L}_{\infty}(qz)\,\delta^{L}_{\mu\nu}(q) + \tilde{Q}^{T}_{\infty}(qz)\,\delta^{T}_{\mu\nu}(q) \qquad (q := (q_\parallel q_z k_3)) \tag{34.8}$$

wie in einem isotropen Medium (Kliewer u. Fuchs*). Wegen

$$\tilde{G}^{\infty}_{\infty\,(\mu\nu)}(qz) = z^2/c^2\,\delta^{L}_{\mu\nu}(q) + (z^2/c^2 - q^2)\,\delta^{T}_{\mu\nu}(q) \tag{34.9}$$

- cf. Gl. (26.6) - folgt

$$\{\tilde{G}^{0}_{\infty} - \tilde{Q}^{q_\parallel}_{\infty}\}^{-1}_{(\mu\nu)}(k_3 k_3') = \{(z^2/c^2 - \tilde{Q}^{L}_{\infty}(qz))^{-1}\,\delta^{L}_{\mu\nu}(q) + (z^2/c^2 - q^2 - \tilde{Q}^{T}_{\infty}(qz))^{-1}\,\delta^{T}_{\mu\nu}(q)\}\cdot a/2\,(\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3,-k_3'}) \tag{34.10}$$

und weiter

$$Z^{pp}_{q_\parallel}(q_\parallel z) = \frac{2iz}{c}\cdot\frac{1}{a}\sum_{k_3}\frac{1}{q_\parallel^2 + k_3^2}\left(\frac{q_\parallel^2}{z^2/c^2 - \tilde{Q}^{L}_{\infty}(qz)} + \frac{k_3^2}{z^2/c^2 - q^2 - \tilde{Q}^{T}_{\infty}(qz)}\right) \tag{34.11}$$

ein Ausdruck, der für den Halbraum-Limes a → ∞ von Silin und Fetisov[44] und von Kliewer und Fuchs[35] angegeben ist. Er soll weiter unten näher betrachtet werden.

Im elektrostatischen Limes c → ∞ strebt dieser Ausdruck gegen

$$\frac{1}{c}\,Z^{pp}_{q_\parallel}(q_\parallel z) = -\frac{2}{iz}\cdot\frac{1}{a}\sum_{k_3}\frac{q_\parallel^2}{q_\parallel^2 + k_3^2}\,\frac{1}{\varepsilon_L(qz)} \tag{34.12}$$

Dabei ist - cf. Gl. (26.18)

$$\varepsilon_L(qz) := 1 - c^2/z^2\,\tilde{Q}^{L}_{\infty}(qz) \tag{34.13}$$

die aus der Boltzmann-Gl. folgende Näherung für die Volumen D.K. Dieser Ausdruck für die Oberflächen-Impedanz $Z^{pp}_{q_\parallel}$ in Verbindung mit Gl. (34.4) entspricht der von Wagner[34] angegebenen Dispersionsrelation für das Oberflächen-Plasmon.

---

*) Tatsächlich zeigen Kliewer und Fuchs dies nur für den Halbraum. Es ist jedoch eine ziemlich triviale Ergänzung, dies auch für die Schicht der Dicke a zu zeigen.

In den letzten Jahren sind immer häufiger "Jellium-Schichten" mit nicht-kastenförmigem Profil betrachtet worden, sei es, daß man in einer klassischen Behandlung die scharfe Kante aufweichte,[55] sei es,daß man in einer quantenmechanischen RPA das Auftreten von Friedel-Oszillationen zu berücksichtigen hatte.[5,48] Für den Vergleich mit diesen Rechnungen muß auf Gl. (34.4f) zurückgegriffen werden. Um eine Entwicklung von $1/c \cdot Z^{pp}_{g/u}$ nach Potenzen von $1/c^2$ zu ermöglichen, soll der zu invertierende Operator*)

$$\{\tilde{G}^{0\,p}_{10} - \tilde{\mathcal{G}}^{p}_{10\,g/u}\}_{(\mu\nu)} = \begin{bmatrix} \{z^2/c^2 - (\hat{k}_3^{g/u})^2 - \tilde{\mathcal{G}}^{(pp)}_{10\,g/u}\}\, q_\parallel q_\parallel / q_\parallel^2 & q_\parallel/q_\parallel \{q_\parallel \hat{k}_3^{g/u} - \tilde{\mathcal{G}}^{(p3)}_{10\,g/u}\} \\ \{\hat{k}_3^{g/u} q_\parallel - \tilde{\mathcal{G}}^{(3p)}_{10\,g/u}\}\, q_\parallel/q_\parallel & \{\chi^2 - \tilde{\mathcal{G}}^{(33)}_{10\,g/u}\} \end{bmatrix} \qquad (34.14)$$

umgeformt werden. Im Limes $c \to \infty$ strebt $\{\chi^2 - \tilde{\mathcal{G}}^{(33)}_{10\,g/u}\}$ gegen die c-Zahl $-q_\parallel^2 (\neq 0)$, so daß für "große c" die Invertierbarkeit gesichert ist. Daher folgt die Umformung

$$\{\tilde{G}^{0\,p}_{10} - \tilde{\mathcal{G}}^{p}_{10\,g/u}\}_{(\mu\nu)} = \begin{bmatrix} \delta_{ik} & q_i/q_\parallel \{q_\parallel \hat{k}_3^{g/u} - \tilde{\mathcal{G}}^{(p3)}_{10\,g/u}\}\{\chi^2 - \tilde{\mathcal{G}}^{(33)}_{10\,g/u}\}^{-1} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (34.15)$$

$$\cdot \begin{bmatrix} \{z^2/c^2 - (\hat{k}_3^{g/u})^2 - \tilde{\mathcal{G}}^{(pp)}_{10\,g/u}\} - \{q_\parallel \hat{k}_3^{g/u} - \tilde{\mathcal{G}}^{(p3)}_{10\,g/u}\}\{\chi^2 - \tilde{\mathcal{G}}^{(33)}_{10\,g/u}\}^{-1}\{\hat{k}_3^{g/u} q_\parallel - \tilde{\mathcal{G}}^{(3p)}_{10\,g/u}\}\, q_k q_i / q_\parallel^2 & 0 \\ \{\hat{k}_3^{g/u} q_\parallel - \tilde{\mathcal{G}}^{(3p)}_{10\,g/u}\}\, q_i/q_\parallel & \{\chi^2 - \tilde{\mathcal{G}}^{(33)}_{10\,g/u}\} \end{bmatrix}$$

---

*) Die Operatoren sind durch ihre Darstellungs-Matrix definiert: $\langle k_3 | \tilde{\mathcal{G}}^{(\mu\nu)}_{10\,g/u} | k_3' \rangle := \tilde{\mathcal{G}}^{(\mu\nu)}_{10\,g/u}(k_3 k_3')$ etc. Die k_3, k_3' sind dabei aus der jeweiligen (g/u-)Klasse zu wählen. Die so definierten Operatoren wirken in dem Raum der a-periodischen/anti-periodischen Distributionen $\mathcal{M}^*_{g/u}$. Er ist Hilbertsch im Sinne von Gelfand-Shilov,[45] die Funktionen $\langle x_3 | k_3 \rangle := e^{ik_3 a}$, k_3 aus der g/u-Klasse, bilden in ihm ein vollständiges, orthogonales und auf a normiertes System. Speziell ist $\hat{k}_3^{g/u}$ der (selbst-adjungierte) Differentiations-Operator $-i\partial_3$ in $\mathcal{M}^*_{g/u}$ mit der Spektraldarstellung: $\hat{k}_3^{g/u} = 1/a \sum_{k_3}^{g/u} |k_3\rangle k_3 \langle k_3|$.

Ihr Vorteil ist, daß sich nun die Inverse der Operatoren-Matrix durch die Inversen ihrer Komponenten angeben läßt:

$$\{\tilde{G}^{\circ p}_{10} - \tilde{\mathfrak{I}}^{p}_{10g_\mu}\}^{-1}_{(\mu\nu)}$$

$$= \begin{bmatrix} \{\zeta^2/c^2 - (\hat{k}_3^{g_\mu})^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(PP)}_{10g_\mu}\} - \{q_\mu \hat{k}_3^{g_\mu} - \tilde{\mathfrak{I}}^{(P3)}_{10g_\mu}\}\{\lambda^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu}\}^{-1}\{\hat{k}_3^{g_\mu} q_\mu - \tilde{\mathfrak{I}}^{(3P)}_{10g_\mu}\}^{-1} q_i q_k / q_\mu^2 & 0 \\ -\{\lambda^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu}\}^{-1}\{\zeta^2/c^2 - (\hat{k}_3^{g_\mu})^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(PP)}_{10g_\mu}\} - \{q_\mu \hat{k}_3^{g_\mu} - \tilde{\mathfrak{I}}^{(P3)}_{10g_\mu}\}\{\lambda^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu}\}^{-1}\{\hat{k}_3^{g_\mu} q_\mu - \tilde{\mathfrak{I}}^{(3P)}_{10g_\mu}\}^{-1} q_k/q_\mu & \{\lambda^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu}\}^{-1} \end{bmatrix}$$

$$\cdot \begin{bmatrix} \delta_{Rj} & -q_R/q_\mu \{q_\mu \hat{k}_3^{g_\mu} - \tilde{\mathfrak{I}}^{(P3)}_{10g_\mu}\}\{\lambda^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu}\}^{-1} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (34.16)$$

Es folgt der etwas explizitere Ausdruck für die Oberflächen-Impedanz:

$$Z^{PP}_{g_\mu}(q_\mu z) = 2i z/c \cdot 1/a^2 \sum_{\substack{g_\mu \\ k_3 k_3'}} \{\zeta^2/c^2 - (\hat{k}_3^{g_\mu})^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(PP)}_{10g_\mu}\} - \{q_\mu \hat{k}_3^{g_\mu} - \tilde{\mathfrak{I}}^{(P3)}_{10g_\mu}\}\{\lambda^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu}\}^{-1}\{\hat{k}_3^{g_\mu} q_\mu - \tilde{\mathfrak{I}}^{(3P)}_{10g_\mu}\}^{-1}(k_3 k_3') \qquad (34.17)$$

Da $\tilde{\mathfrak{I}}^{(PP)}_{10g_\mu}$ linear in $(e/c)^2$ ist, - cf. Gl. (26.12) - folgt durch Entwicklung von $\{\lambda^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu}\}^{-1}$ bis zu Termen linear in $1/c^2$:

$$1/c\, Z^{PP}_{g_\mu}(q_\mu z) = -2/i z \cdot 1/a^2 \sum_{\substack{g_\mu \\ k_3 k_3'}} q_\mu^2/(q_\mu^2 + \hat{k}_3^2)\{1 - c^2/z^2 (q_\mu \tilde{\mathfrak{I}}^{(PP)}_{10g_\mu} q_\mu + q_\mu \tilde{\mathfrak{I}}^{(P3)}_{10g_\mu} \hat{k}_3^{g_\mu} + \hat{k}_3^{g_\mu} \tilde{\mathfrak{I}}^{(3P)}_{10g_\mu} q_\mu + \hat{k}_3^{g_\mu} \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10g_\mu} \hat{k}_3^{g_\mu})\}^{-1}(k_3 k_3') + O(1/c^2)$$

Der Subtrahend in der Inversen ist aber aufgrund der Kontinuitätsgl. (26.15) gleich der Ladungsdichte-Korrelationsfunktion $-\tilde{\chi}^{\circ g_\mu}_{PP}$ eines Systems wechselwirkungsfreier Elektronen im selbstkonsistenten Potential der Schicht. Der Zirkumflex über $\chi^{\circ g_\mu}_{PP}$ soll andeuten, daß diese Funktion wieder periodisch/anti-periodisch aus dem Grundgebiet heraus fortgesetzt zu denken ist. Es folgt also:

$$1/c\, Z^{PP}_{g_\mu}(q_\mu z) = -2/i z \cdot 1/a^2 \sum_{\substack{g_\mu \\ k_3 k_3'}} q_\mu^2/(q_\mu^2 + \hat{k}_3^2)\{1 + \tilde{\chi}^{\circ g_\mu}_{PP}(q_\mu^2 + \hat{k}_3^{g_\mu 2})^{-1}\}^{-1}(k_3 k_3') + O(1/c^2) \qquad (34.18)$$

In der Boltzmann-Näherung, wie oben, gilt wieder

$$\tilde{\chi}^{\circ g_\mu}_{PP}(q_\mu k_3 k_3' z) = \chi^{\circ}_{PP}(qz) \cdot a/2\{\delta_{k_3 k_3'} + \delta_{k_3 -k_3'}\} \qquad (34.19)$$

so daß mit der bekannten RPA-Beziehung

$$\varepsilon_\perp(qz) = 1 + \chi^{\circ}_{PP}(qz)/q^2 \qquad (34.20)$$

sich Gl. (34.12) reproduziert.

Sucht man nach quantenmechanischen Korrekturen in der Oberflächen-Impedanz, also in der Dispersionsrelation des Oberflächen-Plasmons, kann man[5,46] z.B. die Greenfunktion

$$G_{o\alpha}(q_i x_3 x_3' z) = \begin{cases} \frac{2}{a}\sum_{\bar{k}_3>0} \frac{\sin \bar{k}_3 x_3 \cdot \sin \bar{k}_3 x_3'}{\hbar z - \varepsilon(q_i \bar{k}_3)} = \frac{1}{a}\sum_{\bar{k}_3} \frac{\sin \bar{k}_3 x_3 \cdot \sin \bar{k}_3 x_3'}{\hbar z - \varepsilon(q_i \bar{k}_3)} & x_3 \in [0,a] \wedge x_3' \in [0,a] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad (34.21)$$

als approximative RPA-Ein-Elektron-Funktion ansehen. Denn mit der Einteilchen-Energie

$$\varepsilon(q_i \bar{k}_3) = \hbar^2/2m\,(q_i^2 + \bar{k}_3^2) \qquad \bar{k}_3 = n\pi/a \qquad (34.22)$$

beschreibt diese Funktion $G_{o\alpha}$ offenbar ein System freier an den Rändern $x_3=0$ und $x_3=a$ spiegelnd reflektierter Elektronen. Das selbst-konsistente Potential ist also gleich Null angenommen, wie es für das Innere der Schicht sicherlich zutreffend ist. Dazu erfüllt dieses $G_{o\alpha}$ die Randbedingungen bei $x_3=0$ und $x_3=a$, wo dem Modell der strikten Oberfläche gemäß unendlich hohe Potentialbarrieren liegen. Mit diesem $G_{o\alpha}$ bestimmt sich die freie Ladungsdichte-Korrelationsfunktion zu ($\varepsilon > o$ infinitesimal, z_n Bose-, $\bar{z}_n$-Fermifrequenz):

$$\begin{aligned} \chi^o_{ss}(q_i x_3 x_3' z_n) &= -e^2 \cdot 2\hbar/i\,(1/F)(-1/i\hbar\beta)\sum_{q_i \bar{z}_n} e^{i\bar{z}_n\varepsilon}\, G_{o\alpha}(\bar{q}_i x_3 x_3' \bar{z}_n)\, G_{o\alpha}(\bar{q}_i - q_i\, x_3' x_3\, \bar{z}_n - z_n) \\ &= -e^2\, 2/F \sum_{\bar{q}_i} 1/a^2 \sum_{\bar{k}_3 \bar{k}_3'} \sin \bar{k}_3 x_3 \cdot \sin \bar{k}_3' x_3 \cdot \sin \bar{k}_3 x_3' \cdot \sin \bar{k}_3' x_3' \\ &\quad \cdot 1/\beta \sum_{\bar{z}_n} 1/(\hbar \bar{z}_n - \varepsilon(\bar{q}_i \bar{k}_3) \cdot 1/(\hbar(\bar{z}_n - z_n) - \varepsilon(\bar{q}_i - q_i\, \bar{k}_3')) \\ &= -e^2 \cdot 2/F \sum_{\bar{q}_i} 1/2a^2 \sum_{\bar{k}_3 \bar{k}_3'} \{\cos(\bar{k}_3 - \bar{k}_3')x_3 \cdot \cos(\bar{k}_3 - \bar{k}_3')x_3' - \cos(\bar{k}_3 - \bar{k}_3')x_3 \cdot \cos(\bar{k}_3 + \bar{k}_3')x_3'\} \\ x_3, x_3' \in [0,a] \qquad &\cdot \frac{f_o(\varepsilon(\bar{q}_i \bar{k}_3)) - f_o(\varepsilon(\bar{q}_i - q_i\, \bar{k}_3'))}{\varepsilon(\bar{q}_i \bar{k}_3) - \varepsilon(\bar{q}_i - q_i\, \bar{k}_3') - \hbar z_n} \end{aligned}$$

Zuletzt ist mit der bekannten[27] Auswertung der Frequenz-Summation die Fermi-Funktion

$$f_o(\varepsilon) := \{\exp(\varepsilon - \mu)\beta + 1\}^{-1} \qquad (\mu \text{ chem. Potential})$$

eingeführt worden. Durch Variablen-Transformation und Fortsetzung in die komplexe z-Ebene folgt:

$$\chi^o_{ss}(q_i x_3 x_3' z) = -e^2 \cdot 2/F \sum_{\bar{q}_i} 1/2a \sum_{\bar{k}_3} 1/a \sum_{\bar{k}_3'} \{\cos \bar{k}_3' x_3 \cdot \cos \bar{k}_3' x_3' - \cos \bar{k}_3 x_3 \cdot \cos(\bar{k}_3' - 2\bar{k}_3)x_3'\}$$
$$\cdot \frac{f_o(\varepsilon(\bar{q}_i \bar{k}_3)) - f_o(\varepsilon(\bar{q}_i - q_i\, \bar{k}_3 - \bar{k}_3'))}{\varepsilon(\bar{q}_i \bar{k}_3) - \varepsilon(\bar{q}_i - q_i\, \bar{k}_3 - \bar{k}_3') - \hbar z} \qquad (34.23)$$

Die $q|u$-Anteile dieser Funktion sind

$$\chi^{\circ q|u}_{ss}(q_u x_3 x_3' z) = -e^2 \cdot 2/F \sum_{\bar q_i} 1/2a \sum_{\bar k_3} 1/a \sum_{\bar k_3'}^{q|u} \{\cos \bar k_3' x_3 \cdot \cos \bar k_3' x_3' - \cos \bar k_3' x_3 \cdot \cos(\bar k_3' - 2\bar k_3) x_3'\}$$

$$\cdot \frac{f_0(\varepsilon(\bar q_i \bar k_3)) - f_0(\varepsilon(\bar q_i - q_i \bar k_3 - \bar k_3'))}{\varepsilon(\bar q_i \bar k_3) - \varepsilon(\bar q_i - q_i \bar k_3 - \bar k_3') - \hbar z} \qquad (34.24)$$

Die gesuchte Funktion $\tilde\chi^{\circ q|u}_{ss}$ ist folglich gegeben durch:

$$\tilde\chi^{\circ q|u}_{ss}(q_u k_3 k_3' z) = -\frac{a}{2}\{\delta_{k_3 k_3'} + \delta_{k_3 - k_3'}\} \cdot e^2 \frac{2}{F} \sum_{\bar q_i} \frac{1}{2a} \sum_{\bar k_3}^{q|u} \frac{f_0(\varepsilon((\bar q_i + q_i)/2\,(\bar k_3 + k_3)/2)) - f_0(\varepsilon((\bar q_i - q_i)/2\,(\bar k_3 - k_3)/2))}{\varepsilon((\bar q_i + q_i)/2\,(\bar k_3 + k_3)/2) - \varepsilon((\bar q_i - q_i)/2\,(\bar k_3 - k_3)/2) - \hbar z}$$

$$+ e^2 \frac{2}{F} \sum_{\bar q_i} \frac{1}{4} \Bigg\{ \frac{f_0(\varepsilon((\bar q_i + q_i)/2\,(k_3 + k_3')/2)) - f_0(\varepsilon((\bar q_i - q_i)/2\,(k_3 - k_3')/2))}{\varepsilon((\bar q_i + q_i)/2\,(k_3 + k_3')/2) - \varepsilon((\bar q_i - q_i)/2\,(k_3 - k_3')/2) - \hbar z}$$

$$+ \frac{f_0(\varepsilon((\bar q_i + q_i)/2\,(k_3 + k_3')/2)) - f_0(\varepsilon((\bar q_i + q_i)/2\,(k_3 + k_3')/2))}{\varepsilon((\bar q_i - q_i)/2\,(k_3 - k_3')/2) - \varepsilon((\bar q_i + q_i)/2\,(k_3 + k_3')/2) - \hbar z} \Bigg\} \qquad (34.25)$$

oder abgekürzt ($q = q_1, q_2, k_3$):

$$\tilde\chi^{\circ q|u}_{ss}(q_u k_3 k_3' z) = a/2\{\delta_{k_3 k_3'} + \delta_{k_3 - k_3'}\}\chi^{\circ}_{ss}(qz) + S_{q|u}(q_u k_3 k_3' z) \qquad (34.26)$$

so daß für die "elektrostatische" Näherung der Impedanz folgt:

$$\frac{1}{c} Z^{pp}_{q|u}(q_u z) = -\frac{2}{iz} \cdot \frac{1}{a^2} \sum_{k_3 k_3'}^{q|u} \frac{q_u^2}{q_u^2 + k_3^2} \cdot \frac{\{1 + S_{q|u} \varepsilon_L^{-1}(q_u^2 + \hat k_3^{q|u\,2})^{-1}\}^{-1}(k_3 k_3')}{\varepsilon_L(qz)} \qquad (34.27)$$

Dabei ist $\varepsilon_L(qz) := 1 + 1/q^2 \chi^{\circ}_{ss}(qz)$ die bekannte Lindhard-Funktion.[47]

In derselben Näherung lautet die Dispersionsrelation Gl. (34.4):

$$1 + \frac{2}{a^2} \sum_{k_3 k_3'}^{q|u} \frac{q_u}{q_u^2 + k_3^2} \cdot \frac{\{1 + S_{q|u} \varepsilon_L^{-1}(q_u^2 + \hat k_3^{q|u\,2})^{-1}\}^{-1}(k_3 k_3')}{\varepsilon_L(qz)} = 0 \qquad (34.28)$$

wie sie schon von Heger und Wagner[48] mit Hilfe der Bewegungsgleichungsmethode für die Dichtematrix im Falle verschwindender Temperatur (T=0) hergeleitet worden ist. Dort findet sich die weitere Auswertung dieser Gl. im Limes hoher Dichte ($r_s \to 0$).

b) Die Gl. (34.11), d.h. also

$$Z^{pp}_{g/u}(q_\parallel z) = \frac{2iz}{c}\,\frac{1}{a}\int_{k_3}^{\infty}\frac{1}{q_\parallel^2+k_3^2}\left(\frac{q_\parallel^2}{z^2/c^2\,\varepsilon_L(qz)}+\frac{k_3^2}{z^2/c^2\,\varepsilon_T(qz)-q^2}\right)$$

bzw. der Halbraum-Limes $a\to\infty$ erlaubt, vorhandene Berechnungen der Reflektivität durchsichtig zu machen. Nähert man z.B. für ein Metall (freies Elektronengas)

$$\varepsilon_L(qz)\approx 1-\frac{\omega_p^2}{z(z+i\gamma)}-\frac{3}{5}\,\frac{\omega_p^2\,v_F^2}{z(z+i\gamma)^3}\,q^2$$

für Frequenz z in der Nähe der Plasma-Frequenz ω_p^2 und

$$\varepsilon_T(qz)\approx 1-\frac{\omega_p^2}{z(z+i\gamma)}\equiv\varepsilon(z)$$

so folgt die Näherung ($a\to\infty$):

$$Z^{pp}_{g/u}(q_\parallel z)\approx\frac{c/z}{\varepsilon(z)}\left\{\lambda'+\frac{q_\parallel^2}{\eta}\right\} \tag{34.29}$$

Dabei ist $\lambda':=\sqrt{\varepsilon(z)z^2/c^2-q_\parallel^2}$ die x_3-Komponente des Wellenvektors einer transversalen und

$$\eta:=\sqrt{\frac{5}{3}\,\frac{z(z+i\gamma)^3}{\omega_p^2\,v_F^2}\,\varepsilon(z)-q_\parallel^2} \tag{34.30}$$

die einer longitudinalen Welle im Metall-Plasma mit der Frequenz z und dem Betrag $q_\parallel$ der "Parallel"-Komponenten des Wellenvektors. Es folgt der Reflexionskoeffizient:

$$\mathfrak{R}_o^{pp}(q_\parallel z)=\frac{\lambda'-\varepsilon(z)\lambda}{\lambda'+\varepsilon(z)\lambda}\,\frac{1+q_\parallel^2/\eta(\lambda'-\varepsilon(z)\lambda)}{1+q_\parallel^2/\eta(\lambda'+\varepsilon(z)\lambda)} \tag{34.31}$$

$$\approx\frac{\lambda'-\varepsilon(z)\lambda}{\lambda'+\varepsilon(z)\lambda}\left(1+2\,\frac{q_\parallel^2}{\eta}\,\frac{\varepsilon(z)\lambda}{(\lambda'-\varepsilon(z)\lambda)(\lambda'+\varepsilon(z)\lambda)}\right) \tag{34.31a}$$

Das ist - abgesehen von einfachen Umformungen - Gl. (40) der Arbeit von Forstmann[49] über den Einfluß von Plasmawellen auf das Reflexionsvermögen von Metallen. Allerdings hat Forstmann statt Gl. (34.30)

$$\eta=\sqrt{\frac{5}{3}\,\frac{\omega^2(\omega+i\gamma)^2}{v_F^2\cdot\omega_p^2}\,\varepsilon(\omega)}$$

vernachlässigt also den Subtrahenden $q_{\parallel}^2$ im Radikanden. Das ist trotz $q_{\parallel}^2 = \sin^2\vartheta\ \omega^2/c^2 < \omega^2/c^2 \ll \omega^2/v_F^2$ (ϑ Einfallswinkel) bedenklich, da für $\omega \approx \omega_p$ $\varepsilon(\omega)$ klein wird.

c) Das Problem, die Dispersionsrelation des Oberflächen-Polaritons im angelegten Magnetfeld zu bestimmen, war oben schon angesprochen worden. Es ist interessant, daß durch das Magnetfeld - je nach "Geometrie" - nicht nur die Entartung bez. der Ausbreitungsrichtung q_i in der Oberfläche aufgehoben werden kann $-\ \omega_+(q_i B) \neq \omega_+(-q_i B)$ - und eine Aufspaltung des Oberflächen-Polariton-Bands mit einer Frequenzlücke auftritt[50] - es treten vielmehr Zweige des Oberflächen-Polaritons auf, die sich über einen endlichen $q_{\parallel}$-Bereich erstrecken ("virtual excitation SP", "photon driven SP").[51] Sie beginnen bei endlichem $q_{\parallel}$ und/oder hören bei endlichem $q_{\parallel}$ auf.

Die bisher veröffentlichten Berechnungen operieren mit einer lokalen, tensorischen D.K. $\varepsilon_{\mu\nu}(z)$ zur Beschreibung des Mediums im Magnetfeld. Es ist zu erwarten, daß eine mehr mikroskopische Behandlung mit der Boltzmann-Gl. den Einfluß der (stoßfreien) Zyklotron-Dämpfung auf die Dispersion der Oberflächen-Polaritonen zeigen wird. Den Einfluß der analogen Landau-Dämpfung auf die Oberflächen-Plasmonen im Metall hat auf diese Weise Wagner[34] bestimmt.

Die Hilfsmittel für die Lösung dieser Aufgabe liegen bereit*) - für den Halbraum allgemein, für die Schicht jedenfalls in

---

*) cf. Fußnote auf p. 126

"Faraday-Geometrie", d.h. für ein normal zur Schicht stehendes Magnetfeld. Da in diesem Fall die pseudo-skalaren Größen nicht mehr verschwinden, gilt:

$$\tilde{\mathfrak{I}}^{(ij)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_i k_3 k_3' z) = q_i q_j/q_\mu^2\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(pp)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z) + q_i q_j^s/q_\mu^2\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(ps)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z)$$
$$+ q_i^s q_j/q_\mu^2\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(sp)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z) + q_i^s q_j^s/q_\mu^2\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(ss)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z)$$

$$\tilde{\mathfrak{I}}^{(i3)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_i k_3 k_3' z) = q_i/q_\mu\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(p3)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z) + q_i^s/q_\mu\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(s3)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z)$$

$$\tilde{\mathfrak{I}}^{(3j)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_i k_3 k_3' z) = \tilde{\mathfrak{I}}^{(3p)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z) q_j/q_\mu + \tilde{\mathfrak{I}}^{(3s)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z) q_j^s/q_\mu \qquad (34.32)$$

Aus der Boltzmann-Gl. in Verbindung mit der Annahme spiegelnder Reflexion der Elektronen an den Oberflächen folgt wieder[1] ($q := (q_1, q_2, k_3)$):

$$\tilde{\mathfrak{I}}^{(\mu\nu)}_{10\,g_{\mu\nu}}(q_\mu k_3 k_3' z) = \tilde{\mathfrak{I}}^{(\mu\nu)}_{10}(qz)\, a/2\, \{\delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3 -k_3'}\} \qquad (34.33)$$

mit den bulk-Funktionen (Leitfähigkeiten) $\tilde{\mathfrak{I}}^{(\mu\nu)}_{10}(qz)$. (Die Wahl des Vorzeichens erfolgt wie schon oben so, daß $\tilde{\mathfrak{I}}^{(\mu\nu)}_{10\,g_{\mu\nu}}$ die richtige Parität hat.)

Zur Invertierung*) von

$$\{\tilde{G}^{-1}_{10}{}^{(\mu\nu)}(k_3) - \tilde{\mathfrak{I}}^{(\mu\nu)}_{10}(k_3)\}$$

- $\tilde{G}^{-1}_{10}{}^{(\mu\nu)}(k_3)$ wie in Gl. (31.9) eingeführt - gemäß Gl. (31.19f) stellt man zunächst fest, daß die Determinante dieser Matrix durch

$$D(k_3) := \{(z^2/c^2 - k_3^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(pp)}_{10}(k_3))(\chi^2 - k_3^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(ss)}_{10}(k_3)) - \tilde{\mathfrak{I}}^{(ps)}_{10}(k_3)\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(sp)}_{10}(k_3)\}(\chi^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(33)}_{10}(k_3))$$
$$+ \tilde{\mathfrak{I}}^{(ps)}_{10}(k_3)\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(s3)}_{10}(k_3)(k_3 q_\mu - \tilde{\mathfrak{I}}^{(3p)}_{10}(k_3)) + (q_\mu k_3 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(p3)}_{10}(k_3))\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(3s)}_{10}(k_3)\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(sp)}_{10}(k_3)$$
$$- (q_\mu k_3 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(p3)}_{10}(k_3))(k_3 q_\mu - \tilde{\mathfrak{I}}^{(3p)}_{10}(k_3))(\chi^2 - k_3^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(ss)}_{10}(k_3))$$
$$- \tilde{\mathfrak{I}}^{(s3)}_{10}(k_3)\, \tilde{\mathfrak{I}}^{(3s)}_{10}(k_3)(z^2/c^2 - k_3^2 - \tilde{\mathfrak{I}}^{(pp)}_{10}(k_3)) \qquad (34.34)$$

gegeben ist. Die Matrix-Inverse läßt sich nun nach der Kramerschen Regel bestimmen, so daß man erhält:

---

*) Die Rechnungen werden einfach, wenn man $q_2 = 0$ wählt.

$$
\begin{aligned}
Z^{pp}_{gm}(q_n z B) &= 2iz/c \cdot 1/a \int \frac{dk_3}{k_3} D(k_3)^{-1} \{(\lambda^2 - k_3^2 - \Im^{(ss)}_{10}(k_3))(\lambda^2 - \Im^{(33)}_{10}(k_3)) - \Im^{(s3)}_{10}(k_3)\,\Im^{(3s)}_{10}(k_3)\} \\
Z^{ps}_{gm}(q_n z B) &= -2iz/c \cdot 1/a \int \frac{dk_3}{k_3} D(k_3)^{-1} \{\Im^{(ps)}_{10}(k_3)(\lambda^2 - \Im^{(33)}_{10}(k_3)) - (q_n k_3 - \Im^{(p3)}_{10}(k_3))\,\Im^{(3s)}_{10}(k_3)\} \\
Z^{sp}_{gm}(q_n z B) &= -2iz/c \cdot 1/a \int \frac{dk_3}{k_3} D(k_3)^{-1} \{\Im^{(sp)}_{10}(k_3)(\lambda^2 - \Im^{(33)}_{10}(k_3)) - \Im^{(s3)}_{10}(k_3)(k_3 q_n - \Im^{(3p)}_{10}(k_3))\} \\
Z^{ss}_{gm}(q_n z B) &= 2iz/c \cdot 1/a \int \frac{dk_3}{k_3} D(k_3)^{-1} \{(z^2/c^2 - k_3^2 - \Im^{(pp)}_{10}(k_3))(\lambda^2 - \Im^{(33)}_{10}(k_3)) - (q_n k_3 - \Im^{(p3)}_{10}(k_3))(k_3 q_n - \Im^{(3p)}_{10}(k_3))\}
\end{aligned}
\qquad (34.35)
$$

Man entnimmt die Leitfähigkeiten ($\Im^{(\mu\nu)}_{10}(qz) = -iz\sigma_{\mu\nu}(qz)/c^2$) z.B. aus Platzman und Wolff[1] p.155:

$$
\begin{aligned}
\sigma_{pp}(qz) &= i\frac{3\omega_p^2}{\omega_c}\sum_{n=0}^{\infty} n^2 \int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{a}{b^2}\,\frac{J_n(b)^2 \sin^3\vartheta}{a^2 - n^2} \\
\sigma_{ss}(qz) &= i\frac{3\omega_p^2}{\omega_c}\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{a\, J_n'(b)^2 \sin^3\vartheta}{(1+\delta_{n0})(a^2 - n^2)} \\
\sigma_{s3}(qz) &= i\frac{3\omega_p^2}{\omega_c}\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{a\, J_n(b)^2 \cos^2\vartheta \cdot \sin\vartheta}{(1+\delta_{n0})(a^2 - n^2)} \\
\sigma_{p3}(qz) = \sigma_{3p}(qz) &= i\frac{3\omega_p^2}{\omega_c}\sum_{n=0}^{\infty} n^2 \int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{J_n(b)^2 \cdot \sin^2\vartheta \cdot \cos\vartheta}{b^2(a^2 - n^2)} \\
-\sigma_{s3}(qz) = \sigma_{3s}(qz) &= \frac{3\omega_p^2}{\omega_c}\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{a\, J_n(b)\, J_n'(b) \sin^2\vartheta \cdot \cos\vartheta}{(1+\delta_{n0})(a^2 - n^2)} \\
-\sigma_{sp}(qz) = \sigma_{ps}(qz) &= \frac{3\omega_p^2}{\omega_c}\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{a^2}{b}\,\frac{J_n(b)\, J_n'(b) \sin^3\vartheta}{(1+\delta_{n0})(a^2 - n^2)}
\end{aligned}
\qquad (34.36)
$$

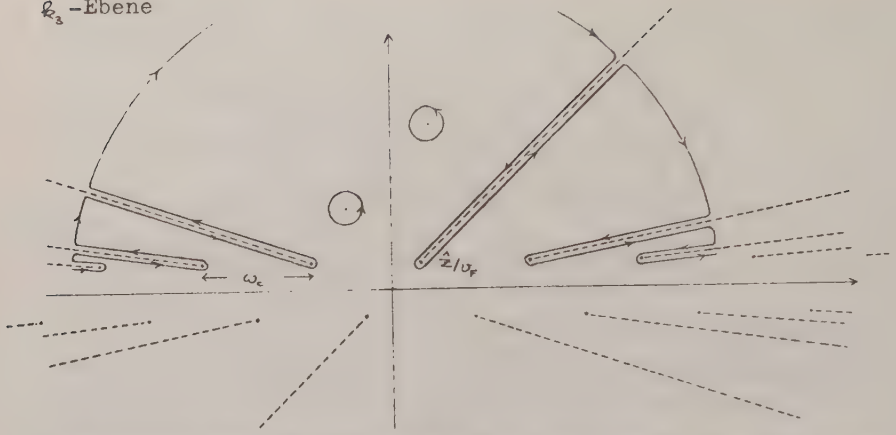
Dabei ist ω_c die Zyklotron-Frequenz, $\omega_c := |e|B/mc$, $J_n(x)$ ist die n-te Bessel-Funktion und

$$a := (z + i\gamma - k_3 v_F \cos\vartheta)/\omega_c \qquad (\gamma > 0 \text{ Stoßfrequenz})$$

$$b := q_n v_F \sin\vartheta/\omega_c \qquad (\hat{z} := z + i\gamma)$$

Der Einfluß der Zyklotron-Dämpfung zeigt sich in den Verzweigungspunkten $k_3 = \pm(\hat{z} - n\omega_c)/v_F$, n ganz.

Abb.9
k_3-Ebene



Im Halbraum-Fall $a \to \infty$ kann die k_3-Integration zur Bestimmung der Oberflächen-Impedanzen längs dem eingezeichneten Wege um die Pole und Schnitte der Integranden in der Ebene erfolgen. Die Oberflächen-Plasmonen im Magnetfeld sind dann durch die Wurzeln von

$$(c\lambda/z + Z^{pp}(q_\parallel z))(z/c\lambda + Z^{ss}(q_\parallel z)) - Z^{ps}(q_\parallel z) Z^{sp}(q_\parallel z) = 0$$

gegeben. Offensichtlich bleibt in dieser Geometrie die Entartung bezüglich der Richtung des ebenen Wellenvektors (q_i vs.$-q_i$) erhalten.

Das Problem, die Dispersionsrelation dieses "Magneto-Oberflächenplasmons" zu bestimmen, vereinfacht sich für wenn also die Oberflächenwelle so kurzwellig ist, daß die Retardierung vernachlässigt werden kann: $c \to \infty$ bei ω_c =const.

Jetzt ist einfacher

$$\mathcal{D}(k_3) = 1/c^2 (q_\parallel^2 + k_3^2)\{q_\parallel^2 (z^2 + iz\sigma_{pp}) + 2q_\parallel k_3 iz\sigma_{ps} + k_3^2 (z^2 + iz\sigma_{ss})\} + O(1/c^4)$$

$$= z^2/c^2 (q_\parallel^2 + k_3^2)\{(q_\parallel^2 + k_3^2) + \chi^0_{ss}\} + O(1/c^4) \qquad (34.37)$$

Mit der Ladungsdichte-Korrelationsfunktion $\chi^0_{ss}(q_\parallel k_3 z)$ eines idealen (entarteten) Gases im Magnetfeld, wie sie sich aus Gln. (34.36) mittels der Kontinuitätsgl. oder auch direkt

aus der Boltzmann-Gl. ergibt:

$$\chi^{\circ}_{ss}(q_{\parallel} k_3 z) = k^2_{TF}\left\{1 - \frac{z}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_0^{\pi} d\vartheta\, \frac{\sin\vartheta \cdot J_n^2(k_{\parallel} v_F/\omega_c \sin\vartheta)}{z + n\omega_c - k_3 v_F \cos\vartheta}\right\} \qquad (34.38)$$

(Das Quadrat des Thomas-Fermi-Wellenvektors ist: $k^2_{TF} = 3\omega_p^2/v_F^2$.).

Daraus folgt im einzelnen

$$\frac{1}{c} Z^{pp}_{q k_{\parallel}} = -\frac{2}{iz} \cdot \frac{1}{a} \sum_{k_3}^{q k_{\parallel}} \frac{q_{\parallel}^2}{q_{\parallel}^2 + k_3^2} \cdot \frac{1}{1 + \chi^{\circ}_{ss}(q_{\parallel}^2 + k_3^2)} + O(1/c^2)$$

$$Z^{ps}_{q k_{\parallel}} = O(1/c),\ Z^{sp}_{q k_{\parallel}} = O(1/c) \text{ und } Z^{ss}_{q k_{\parallel}} = O(1/c) \qquad (34.39)$$

Die (implizite) Dispersionsrelation (33.2) entartet zu $iq_{\parallel}/z + 1/c\, Z^{pp}_{q k_{\parallel}} = 0$ also

$$1 + \frac{2}{a} \sum_{k_3}^{q k_{\parallel}} \frac{q_{\parallel}}{q_{\parallel}^2 + k_3^2} \cdot \frac{1}{1 + \chi^{\circ}_{ss}(q_{\parallel} k_3 z)/(q_{\parallel}^2 + k_3^2)} = 0 \qquad (34.40)$$

Begnügt man sich nach dem Vorbild von Wagner[34] mit der Näherung

$$1 + \frac{2}{a} \sum_{k_3}^{q k_{\parallel}} \frac{q_{\parallel}}{q_{\parallel}^2 + k_3^2} \cdot \frac{1}{1 + \chi^{\circ}_{ss}(0 k_3 z)/k_3^2} = 0\,,$$

die für die Bestimmung des in $q_{\parallel}$ linearen Terms der Dispersionsrelation sicher ausreicht, so geht der Einfluß des Magnetfeldes völlig verloren und man ist wieder bei Gl. (34.12) angelangt. Es ist auch physikalisch verständlich, daß der Einfluß des Magnetfeldes über die Lorentzkraft auf die Dispersion der Oberflächen-Welle erst merklich wird, wenn diese mehr Impuls quer zum Magnetfeld transportiert. Mit wachsendem Wellenvektor $q_{\parallel}$ tragen zu immer höheren Harmonischen von ω_c gehörige Verzweigungspunkte (Schnitte) zur (stoßfreien) Zyklotron-Dämpfung bei.

Die (numerische) Auswertung von Gl. (34.40) und der Vergleich mit den Ergebnissen der lokalen Theorie erfolge a.a.O. Es ist jedoch offensichtlich, daß für $\omega \approx n\omega_c$, wenn also ein Schnitt bis in die Nähe des Ursprungs der k_3-Ebene reicht, dieser in der lokalen Theorie vernachlässigte Beitrag das Oberflächen-

Plasmon stark dämpfen kann. Allerdings gilt in Metall-Plasmen $\omega_c \ll \omega_p$; z.B. hat man selbst für hohe Magnetfelder von 10^6G erst $\omega_c \approx 10^{13} s^{-1}$ verglichen mit $\omega_p \approx 10^{16} s^{-1}$. Man denkt besser an Halbmetalle wie reinstes Bi, für das $\omega_p \approx 10^{14} s^{-1}$ gilt. Wegen der kleinen effektiven Masse ($m^* = 0{,}1 m_e$) ist aber auch $\omega_c \approx 10^{14} s^{-1}$ für ein Magnetfeld der erwähnten Stärke. In den entarteten Elektronenplasmen hochdotierter Halbleiter wie z.B. n-InSb erreicht man $\omega_c \approx \omega_p$ schon mit wesentlich kleineren Magnetfeldern.

VIII.
35. Störungsrechnung für Korrekturen $\delta\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{10}(q_i q_3' q_3' z)$

In Anwendung des Abschnitts (V. 27) kann man nun nach dem Effekt $\delta Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_i q_3' q_3 z)^*$ fragen, den eine Abweichung $\delta\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{10}(q_i q_3' q_3 z)$ von einem $\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{10}(q_i q_3' q_3 z)$ gemäß Gl. (27.1) bewirkt. Nach dieser Gl. ist die lineare Näherung gegeben durch

$$\delta Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3' q_3')^*_{(1)} = 1/L^2 \sum_{\bar{q}_3 \bar{q}_3'} \{ L\, \delta_{q_3' \bar{q}_3} \delta_{\rho\bar{\rho}} + Q^{(\mu\rho)}_{10}(q_3' \bar{q}_3')^* G^{\circ(\rho\bar{\rho})}_{10}(\bar{q}_3') \} \delta\tilde{Q}^{(\bar{\rho}\bar{\nu})}_{10}(\bar{q}_3 \bar{q}_3') \{ L\, \delta_{\bar{q}_3' q_3} \delta_{\bar{\nu}\nu} + G^{\circ(\bar{\nu}\bar{\sigma})}_{10}(\bar{q}_3') Q^{(\bar{\sigma}\nu)}_{10}(\bar{q}_3' q_3)^* \} \quad (35.1$$

Dabei ist $Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3' q_3)^*$ durch $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(k_3' k_3)^*$ gegeben gemäß

$$Q^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(q_3' q_3)^* = \frac{1}{a^2} \sum_{k_3' k_3} \frac{1 \mp e^{-i q_3' a}}{q_3' - k_3'}\, \mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(k_3' k_3)^* \frac{1 \mp e^{i q_3 a}}{q_3 - k_3} \quad (35.2$$

und $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(k_3' k_3)^*$ durch $\tilde{\mathcal{Q}}^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(k_3' k_3)$ gemäß Gl. (31.16). Die volle Korrektur $\delta Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3' q_3)^*$ ist dann bestimmt durch die Gl.

$$\delta Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3' q_3')^* = \delta Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3' q_3')^*_{(1)} + 1/L^2 \sum_{\bar{q}_3 \bar{q}_3'} \delta Q^{(\mu\bar{\rho})}_{10}(q_3' \bar{q}_3')^*_{(1)}\, D^{(\bar{\rho}\bar{\sigma})}_{10}(\bar{q}_3 \bar{q}_3')\, \delta Q^{(\bar{\sigma}\nu)}_{10}(\bar{q}_3' q_3)^* . \quad (35.3$$

Dabei ist für den Augenblick abgekürzt worden:

$$D^{(\mu\nu)}_{10}(q_3 q_3') := L\, \delta_{q_3 q_3'} G^{\circ(\mu\nu)}_{10}(q_3) - G^{\circ(\mu\rho)}_{10}(q_3)\, \tilde{Q}^{(\rho\sigma)}_{10}(q_3 q_3')\, G^{\circ(\sigma\nu)}_{10}(q_3').$$

Als nullte Näherung $\tilde{\mathcal{Q}}^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(k_3' k_3)$ ist offenbar wieder ein

$$\tilde{\mathcal{Q}}^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(k_3 k_3') = \mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10}(k_3)\, a/2 \{ \delta_{k_3 k_3'} \pm \delta_{k_3 - k_3'} \}$$

am praktischsten, da sich dann $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\, g_1 m}(k_3 k_3')^*$ nach Gl. (31.20) unmittelbar angeben läßt. Es sind nur noch eine Matrix-Inversion und vier k_3-Summationen durchzuführen. Immerhin sind selbst für $\tilde{\mathcal{Q}}^{(\mu\nu)}_{10}$ die Schwierigkeiten bei der

Ausführung nicht gering. $\delta\tilde{Q}_{10}^{(\mu\nu)}(q_3'q_3)$ steht für die jeweils interessierende Korrektur an diesem $\tilde{Q}_{10}^{(\mu\nu)}(q_3'q_3)$: Abweichung von der spiegelnden Reflexion der Elektronen, Abweichungen des Dichteprofils von der Kastenform, Differenz zwischen quantenmechanischer RPA und Boltzmann-Gleichungs-Näherung etc.

Da die erwähnten praktischen Schwierigkeiten bei der Berechnung von $\mathfrak{Q}_{10}^{(\mu\nu)}(k_3'k_3)^*$ sich im weiteren vervielfachen (zwei Summationen zur Berechnung von $Q_{10\,g/u}^{(\mu\nu)}(q_3'q_3)^*$, q_3-Summationen bei der Bestimmung von $\delta Q_{10\,g/u}^{(\mu\nu)}(q_3'q_3)^*$), soll hier die einfachste Näherung für $\mathfrak{Q}_{10}^{(\mu\nu)}(k_3)$ ausreichen. Im Sinne einer Hochfrequenz-Approximation (cf. Gl. (26.12): Vernachlässigung der "RPA-Blase" $-1/c^2\,\overset{\circ}{\chi}_{j_\mu j_\nu}$) für ein <u>isotropes Medium</u> werde genähert (lokale Näherung):

$$\mathfrak{Q}_{10}^{(\mu\nu)}(q_\parallel k_3 z) = \delta_{\mu\nu}\,\omega_p^2/c^2 \qquad \text{oder} \qquad \mathfrak{Q}_{10}^{(\mu\nu)}(q_\parallel k_3 z) = -iz\sigma(z)/c^2\cdot\delta_{\mu\nu} \tag{35.4}$$

Jetzt wird sehr einfach*)

$$\{\overset{\circ}{G}{}_{10}^{-1}(k_3) - \mathfrak{Q}_{10}(k_3)\}^{-1}_{(\mu\nu)} = \delta^L_{\mu\nu}(q)\,(\varepsilon(z)z^2/c^2)^{-1} + \delta^T_{\mu\nu}(q)\,1/(\lambda^2 - k_3^2) \tag{35.5}$$

mit $q=(q_1q_2k_3)$; $\varepsilon(z) = 1-\sigma(z)/iz$ und dem schon eingeführten**)

$$\lambda'^2 := \varepsilon(z)\,z^2/c^2 - q_\parallel^2$$

Es folgen die Oberflächen-Impedanzen:

$$Z^{pp}_{g/u}(q_\parallel z) = 1/\varepsilon(z)\,(c\lambda'/z)\,(1\pm e^{i\lambda' a})/(1\mp e^{i\lambda' a})$$

$$Z^{ss}_{g/u}(q_\parallel z) = (z/c\lambda')\,(1\pm e^{i\lambda' a})/(1\mp e^{i\lambda' a}) \tag{35.6a-b}$$

Die anderen verschwinden wie alle pseudo-skalaren Größen.

---

*) Im folgenden wird statt $\delta^L_{\mu\nu}(q)$ u.ä. einfacher $\delta^L_{\mu\nu}(k_3)$ u.ä. geschrieben werden.

**) also: $\lambda^2 - \lambda'^2 = -iz\sigma(z)/c^2$

Aus den Oberflächen-Impedanzen ergeben sich die RTK nach Gl. (32.3) oder äquivalent nach Gl. (11.13):

$$\mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_\parallel z) = \frac{\mathcal{R}^{pp}_{o}(q_\parallel z)(1-(e^{i\lambda' a})^2)}{1-(\mathcal{R}^{pp}_{o}(q_\parallel z)e^{i\lambda' a})^2} \qquad \mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_\parallel z) = \frac{1-(\mathcal{R}^{pp}_{o}(q_\parallel z))^2}{1-(\mathcal{R}^{pp}_{o}(q_\parallel z)e^{i\lambda' a})^2}\, e^{i\lambda' a}$$

$$\mathcal{R}^{ss}_{(i)}(q_\parallel z) = \frac{\mathcal{R}^{ss}_{o}(q_\parallel z)(1-(e^{i\lambda' a})^2)}{1-(\mathcal{R}^{ss}_{o}(q_\parallel z)e^{i\lambda' a})^2} \qquad \mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_\parallel z) = \frac{1-(\mathcal{R}^{ss}_{o}(q_\parallel z))^2}{1-(\mathcal{R}^{ss}_{o}(q_\parallel z)e^{i\lambda' a})^2}\, e^{i\lambda' a} \qquad (35.7a\text{-}d)$$

mit

$$\mathcal{R}^{pp}_{o}(q_\parallel z) = \frac{\lambda' - \varepsilon\lambda}{\lambda' + \varepsilon\lambda} \qquad \mathcal{R}^{ss}_{o}(q_\parallel z) = \frac{\lambda - \lambda'}{\lambda + \lambda'}\,, \qquad (35.8)$$

also die Airyschen bzw. Fresnelschen Formeln wie in dem Beispiel oben (Ab.17) schon betrachtet. Aus Gl. (31.20) folgt für $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\,g'_m}(k_3 k'_3)^*$

$$\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\,g'_m}(k_3 k'_3)^* = (\lambda^2 - \lambda'^2)\Big(\Big\{\delta^L_{\mu\nu}(k_3)\frac{1}{\varepsilon(z)} + \delta^T_{\mu\nu}(k_3)\Big(1 \pm \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2 - k_3^2}\Big)\Big\}\,\frac{a}{2}\big(\delta_{k_3,k'_3} \pm \delta_{k_3,-k'_3}\big)$$

$$-\Big\{\delta^L_{\mu i}(k_3)\frac{1}{\varepsilon(z)z^2/c^2} + \delta^T_{\mu i}(k_3)\frac{1}{\lambda'^2 - k_3^2}\Big\}\cdot 2i\lambda\Big(\frac{z}{c\lambda}\Big)(\lambda^2-\lambda'^2)\cdot$$

$$\cdot\Big(\frac{q_i q_j}{k_\parallel^2}\Big(\frac{1}{c\lambda/z + Z^{pp}_{g_m}} + \frac{q_i^s q_j^s}{k_\parallel^2}\Big(\frac{1}{z/c\lambda + Z^{ss}_{g_m}}\Big)\Big\{\delta^L_{j\nu}(k'_3)\frac{1}{\varepsilon(z)z^2/c^2} + \delta^T_{j\nu}(k'_3)\frac{1}{\lambda'^2 - k_3'^2}\Big\}\Big) \qquad (35.9)$$

Aus $\mathcal{Q}^{(\mu\nu)}_{10\,g'_m}(k_3 k'_3)^*$ erhält man mit Gl. (35.2) die Funktionen $Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3 q'_3)^*$. Obwohl im folgenden nicht das volle $Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3 q'_3)^*$ benötigt wird, um über $\delta Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3 q'_3)^*$ die Korrekturen $\delta\mathcal{R}^{pp}_{(i)}(q_i z)_{10}$, $\delta\mathcal{R}^{ss}_{(i)}(q_i z)_{10}$, $\delta\mathcal{T}^{pp}_{(i)}(q_i z)_{10}$ und $\delta\mathcal{T}^{ss}_{(i)}(q_i z)_{10}$ zu bestimmen, - hierfür genügen $Q^{(\mu\nu)}_{10}(\pm\lambda q'_3)^*$ und $Q^{(\mu\nu)}_{10}(q_3 \pm \lambda)^*$ - soll diese Funktion, also im wesentlichen die Stromdichte-Korrelationsfunktion, jetzt komponentenweise aufgelistet werden.*)

---

*) Gegebenenfalls fahre man mit p. 149 fort!

$$Q_{\infty}^{(i,j)}(q_3 q_3')^{*} = \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3'^2}\Big(\Big\{(\lambda^2-q_3^2)\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q_\infty^2}\cdot\frac{1}{\varepsilon(z)}\Big(\frac{c q_\nu}{z}\Big)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\Big\}\frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}$$

$$+\frac{q_i q_j}{q_\infty^2}\cdot\frac{1}{\varepsilon(z)}\Big(\frac{c\lambda'}{z}\Big)^2\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\cdot$$

$$\cdot\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big((\lambda'-\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3)\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} - (\lambda'+\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3)\frac{e^{-i(q_3-\lambda')a}-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')}\Big)$$

$$-(\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big((\lambda'-\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3)\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda'-q_3')} - (\lambda'+\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3)\frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a}-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(\lambda'+q_3')}\Big)\Big\}$$

$$+\frac{q_i^{\varepsilon} q_3^{\varepsilon}}{q_\infty^2}\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda+\lambda')^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')^2}$$

$$\cdot\Big\{(\lambda+\lambda')\Big((\lambda-q_3)\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} - (\lambda+q_3)\frac{e^{-i(q_3-\lambda')a}-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')}\Big)$$

$$-(\lambda-\lambda')\Big((\lambda-q_3)\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda'-q_3')} - (\lambda+q_3)\frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a}-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(\lambda'+q_3')}\Big)\Big\}\Big)$$

$$=\Big(\frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}\Big\{(\lambda^2-q_3'^2)\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q_\infty^2}\cdot\frac{1}{\varepsilon(z)}\Big(\frac{c q_\nu}{z}\Big)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\Big\}$$

$$-\frac{q_i q_j}{q_\infty^2}\frac{1}{\varepsilon(z)}\Big(\frac{c\lambda'}{z}\Big)^2\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\cdot$$

$$\cdot\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big(\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}(\lambda'+\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3') - \frac{e^{-i(q_3-q_3')a}-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(q_3+\lambda')}(\lambda'-\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3')\Big)$$

$$-(\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big(\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-\lambda')}(\lambda'-\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3') - \frac{e^{-i(q_3-\lambda')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3+\lambda')}(\lambda'+\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}q_3')\Big)\Big\}$$

$$-\frac{q_i^{\varepsilon} q_3^{\varepsilon}}{q_\infty^2}\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda+\lambda')^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')^2}\cdot$$

$$\cdot\Big\{(\lambda+\lambda')\Big(\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}(\lambda+q_3') - \frac{e^{-i(q_3-q_3')a}-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(q_3+\lambda')}(\lambda-q_3')\Big)$$

$$-(\lambda-\lambda')\Big(\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-\lambda')}(\lambda-q_3') - \frac{e^{-i(q_3-\lambda')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3+\lambda')}(\lambda+q_3')\Big)\Big\}\Big)\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3'^2}$$

(35.10a-b)

$$Q^{(i3)}_{\infty 0}(q_3 q_3')^{*} = \frac{q_i'}{q_\infty'} \cdot \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3'^2} \Big(-\frac{1}{\varepsilon(z)} \cdot \frac{c q_\infty' c q_3}{z^2} \cdot (\lambda^2-\lambda'^2) \frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}$$

$$+ \frac{1}{\varepsilon(z)} \cdot \frac{c q_\infty' \cdot c\lambda'}{z^2} \cdot \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}$$

$$\cdot \Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big((\lambda' - \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'} q_3) \frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} + (\lambda'+\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'} q_3) \frac{e^{-i(q_3-\lambda')a} - e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')} \Big)$$

$$+ (\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big((\lambda' - \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'} q_3) \frac{e^{i(\lambda'+q_3')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda'-q_3')} + (\lambda'+\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'} q_3) \frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a} - e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(\lambda'+q_3')} \Big) \Big\} \Big)$$

$$= \frac{q_i'}{q_\infty'} \Big(-\frac{1}{\varepsilon(z)} \cdot \frac{c q_\infty' c q_3'}{z^2} \cdot (\lambda^2-\lambda'^2) \frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}$$

$$+ \frac{1}{\varepsilon(z)} \cdot \frac{c q_\infty \cdot c\lambda'}{z^2} \cdot \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}$$

$$\cdot \Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big(\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')} (\varepsilon\lambda+q_3') + \frac{e^{-i(q_3-q_3')} - e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(q_3+\lambda')} (\varepsilon\lambda - q_3') \Big) \qquad (35.11a\text{-}b)$$

$$+ (\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big(\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a} - (e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-\lambda')} (\varepsilon\lambda - q_3') + \frac{e^{-i(q_3-\lambda')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3+\lambda')} (\varepsilon\lambda+q_3') \Big) \Big\} \Big) \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3'^2}$$

$$Q^{(3i)}_{\infty 0}(q_3 q_3')^{*} = \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3^2} \Big(-\frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{c q_3 c q_\infty'}{z^2} (\lambda^2-\lambda'^2) \frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}$$

$$+ \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{c\lambda' \cdot c q_\infty'}{z^2} \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}$$

$$\cdot \Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big((\varepsilon\lambda - q_3) \frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} + (\varepsilon\lambda+q_3) \frac{e^{-i(q_3-\lambda')a} - e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')} \Big)$$

$$- (\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big((\varepsilon\lambda - q_3) \frac{e^{i(\lambda'+q_3')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda'-q_3')} + (\varepsilon\lambda+q_3) \frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a} - e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(\lambda'+q_3')} \Big) \Big\} \Big) \frac{q_i'}{q_\infty'}$$

$$= \Big(-\frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{c q_3' c q_\infty'}{z^2} (\lambda^2-\lambda'^2) \frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}$$

$$+ \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{c\lambda' \cdot c q_\infty'}{z^2} \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}$$

$$\cdot \Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big(\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')} (\lambda' + \varepsilon(z)\frac{\lambda}{\lambda'} q_3') + \frac{e^{-i(q_3-q_3')a} - e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(q_3+\lambda')} (\lambda' - \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'} q_3') \Big) \qquad (35.12a\text{-}b)$$

$$- (\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big(\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a} - (e^{i\lambda' a})^2 e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-\lambda')} (\lambda' - \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'} q_3') + \frac{e^{-i(q_3-\lambda')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3+\lambda')} (\lambda' + \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'} q_3') \Big) \Big\} \Big) \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3'^2} \cdot \frac{q_i'}{q_\infty'}$$

$$Q_{10}^{(33)}(q_3 q_3')^* = \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3^2}\left(\left\{\frac{1}{\varepsilon(z)}(\lambda^2-q_3^2)-\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c\lambda}{z}\right)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\right\}\frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}\right.$$

$$+\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda'a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\,\cdot$$

$$\cdot\left\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\left((\varepsilon\lambda-q_3)\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')}-(\varepsilon\lambda+q_3)\frac{e^{-i(q_3-\lambda')a}-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')}\right)\right.$$

$$\left.\left.+(\lambda'-\varepsilon\lambda)\left((\varepsilon\lambda-q_3)\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda'a})^2}{i(\lambda'-q_3')}-(\varepsilon\lambda+q_3)\frac{(e^{i\lambda'a})^2e^{-i(q_3-q_3')a}-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(\lambda'+q_3')}\right)\right\}\right)$$

$$=\left(\left\{\frac{1}{\varepsilon(z)}(\lambda^2-q_3'^2)-\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c\lambda}{z}\right)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\right\}\frac{1-e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-q_3')}\right.$$

$$-\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda'a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\,\cdot$$

$$\cdot\left\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\left(\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}(\varepsilon\lambda+q_3')-\frac{e^{-i(q_3-q_3')a}-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(q_3+\lambda')}(\varepsilon\lambda-q_3')\right)\right.$$

$$\left.\left.+(\lambda'-\varepsilon\lambda)\left(\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda'a})^2e^{-i(q_3-q_3')a}}{i(q_3-\lambda')}(\varepsilon\lambda-q_3')-\frac{e^{-i(q_3-\lambda')a}-(e^{i\lambda'a})^2}{i(q_3+\lambda')}(\varepsilon\lambda+q_3')\right)\right\}\right)\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'^2-q_3'^2}$$

$$.\qquad(35.13a\text{-}b)$$

Speziell ist

$$Q_{\lambda_0}^{(i,j)}(\pm\lambda q_3')^{*} = \frac{q_i q_j}{q_0^2}\,\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c q_0}{z}\right)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\,\frac{1-e^{-i(\pm\lambda-q_3')a}}{i(\pm\lambda-q_3')}$$

$$-\frac{q_i q_j}{q_0^2}\cdot\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c\lambda'}{z}\right)^2\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}$$

$$\cdot\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big((\lambda'\mp\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')}-(\lambda'\pm\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)e^{\mp i\lambda a}\frac{e^{i\lambda' a}-e^{iq_3' a}}{i(\lambda'-q_3')}\Big)$$

$$-(\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big((\lambda'\mp\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda'-q_3')}-(\lambda'\pm\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)e^{\mp i\lambda a}\frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{iq_3' a}-e^{i\lambda' a}}{i(\lambda'+q_3')}\Big)\Big\}$$

$$-\frac{q_0^s q_i^s}{q_0^2}\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda+\lambda')^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')^2}$$

$$\cdot\Big\{(\lambda+\lambda')\Big((\lambda\mp\lambda)\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')}-(\lambda\pm\lambda)e^{\mp i\lambda a}\frac{e^{i\lambda' a}-e^{iq_3' a}}{i(\lambda'-q_3')}\Big)$$

$$-(\lambda-\lambda')\Big((\lambda\mp\lambda)\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda'-q_3')}-(\lambda\pm\lambda)e^{\mp i\lambda a}\frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{iq_3' a}-e^{i\lambda' a}}{i(\lambda'+q_3')}\Big)\Big\}\qquad(35.14)$$

$$Q_{\lambda_0}^{(i,j)}(q_3'\pm\lambda)^{*} = \frac{q_i q_j}{q_0^2}\,\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c q_0}{z}\right)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\,\frac{1-e^{-i(q_3'\mp\lambda)a}}{i(q_3'\mp\lambda)}$$

$$+\frac{q_i q_j}{q_0^2}\,\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c\lambda'}{z}\right)^2\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}$$

$$\cdot\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big(\frac{1-e^{-i(q_3'-\lambda')a}}{i(q_3'-\lambda')}(\lambda'\pm\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)-\frac{e^{-iq_3' a}-e^{i\lambda' a}}{i(q_3'+\lambda')}e^{\pm i\lambda a}(\lambda'\mp\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)\Big)$$

$$-(\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big(\frac{e^{i\lambda' a}-(e^{i\lambda' a})^2 e^{-iq_3' a}}{i(q_3'-\lambda')}e^{\pm i\lambda a}(\lambda'\mp\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)-\frac{e^{-i(q_3'-\lambda')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3'+\lambda')}(\lambda'\pm\varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)\Big)\Big\}$$

$$+\frac{q_0^s q_i^s}{q_0^2}\cdot\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda+\lambda')^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')^2}\cdot$$

$$\cdot\Big\{(\lambda+\lambda')\Big(\frac{1-e^{-i(q_3'-\lambda')a}}{i(q_3'-\lambda')}(\lambda\pm\lambda)-\frac{e^{-iq_3' a}-e^{i\lambda' a}}{i(q_3'+\lambda')}e^{\pm i\lambda a}(\lambda\mp\lambda)\Big)$$

$$-(\lambda-\lambda')\Big(\frac{e^{i\lambda' a}-(e^{i\lambda' a})^2 e^{-iq_3' a}}{i(q_3'-\lambda')}e^{\pm i\lambda a}(\lambda\mp\lambda)-\frac{e^{-i(q_3'-\lambda')a}-(e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3'+\lambda')}(\lambda\pm\lambda)\Big)\Big\}\qquad(35.15)$$

$$i(\pm\lambda - q_3')$$

$$- \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{cq_n}{z^2} \frac{c\lambda'}{} \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda' - \varepsilon\lambda)^2} \cdot \tag{35.16}$$

$$\cdot \Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big((\lambda' \mp \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda) \frac{1 - e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} + (\lambda' \pm \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda) e^{\mp i\lambda a} \frac{e^{i\lambda' a} - e^{iq_3' a}}{i(\lambda' - q_3')} \Big)$$

$$+ (\lambda' - \varepsilon\lambda)\Big((\lambda' \mp \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda) \frac{e^{i(\lambda'+q_3')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda' - q_3')} + (\lambda' \pm \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda) e^{\mp i\lambda a} \frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{iq_3' a} - e^{i\lambda' a}}{i(\lambda' - q_3')} \Big) \Big\} \Big)$$

$$Q_{10}^{(i3)}(q_3 \pm \lambda)^* = \frac{q_i}{q_n} \Big(\pm \frac{1}{\varepsilon(z)} \cdot \frac{c\lambda}{z^2} \frac{cq_n}{} (\lambda^2 - \lambda'^2) \frac{1 - e^{-i(q_3 \mp \lambda)a}}{i(q_3 \mp \lambda)}$$

$$- \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{cq_n}{z^2} \frac{c\lambda'}{} \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda' - \varepsilon\lambda)^2} \cdot \tag{35.17}$$

$$\Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big(\frac{1 - e^{-i(q_3 - \lambda')a}}{i(q_3 - \lambda')} (\varepsilon \pm 1)\lambda + \frac{e^{-iq_3 a} - e^{i\lambda' a}}{i(q_3 + \lambda')} e^{\pm i\lambda a} (\varepsilon \mp 1)\lambda \Big)$$

$$+ (\lambda' - \varepsilon\lambda)\Big(\frac{e^{i\lambda' a} - (e^{i\lambda' a})^2 e^{-iq_3 a}}{i(q_3 - \lambda')} e^{\pm i\lambda a} (\varepsilon \mp 1)\lambda + \frac{e^{-i(q_3 - \lambda')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3 + \lambda')} (\varepsilon \pm 1)\lambda \Big) \Big\} \Big)$$

$$Q_{10}^{(3j)}(\pm\lambda q_3')^* = \Big(\pm \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{c\lambda}{z^2} \frac{cq_n}{} (\lambda^2 - \lambda'^2) \frac{1 - e^{-i(\pm\lambda - q_3')a}}{i(\pm\lambda - q_3')}$$

$$- \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{c\lambda' cq}{z^2} \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda' - \varepsilon\lambda)^2} \cdot \tag{35.18}$$

$$\Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big((\varepsilon \mp 1) \frac{1 - e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} + (\varepsilon \pm 1)\lambda \cdot e^{\mp i\lambda a} \frac{e^{i\lambda' a} - e^{iq_3' a}}{i(\lambda' - q_3')} \Big)$$

$$- (\lambda' - \varepsilon\lambda)\Big((\varepsilon \mp 1) \frac{e^{i(\lambda'+q_3')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(\lambda' - q_3')} + (\varepsilon \pm 1) \cdot e^{\mp i\lambda a} \frac{(e^{i\lambda' a})^2 e^{iq_3' a} - e^{i\lambda' a}}{i(\lambda' + q_3')} \Big) \Big\} \Big) \frac{q_j}{q_n}$$

$$Q_{10}^{(3j)}(q_3 \pm \lambda)^* = \Big(\pm \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{cq_n}{z^2} \frac{c\lambda}{} (\lambda^2 - \lambda'^2) \frac{1 - e^{-i(q_3 \mp \lambda)a}}{i(q_3 \mp \lambda)}$$

$$- \frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{c\lambda' cq_n}{z^2} \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda' - \varepsilon\lambda)^2} \cdot \tag{35.19}$$

$$\Big\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big(\frac{1 - e^{-i(q_3 - \lambda')a}}{i(q_3 - \lambda')} (\lambda' \pm \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda) + \frac{e^{-iq_3 a} - e^{i\lambda' a}}{i(q_3 + \lambda')} e^{\pm i\lambda a} (\lambda' \mp \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda)$$

$$- (\lambda' - \varepsilon\lambda)\Big(\frac{e^{i\lambda' a} - (e^{i\lambda' a})^2 e^{-iq_3 a}}{i(q_3 - \lambda')} e^{\pm i\lambda a} (\lambda' \mp \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda) + \frac{e^{-i(q_3 - \lambda')a} - (e^{i\lambda' a})^2}{i(q_3 + \lambda')} (\lambda' \pm \varepsilon\frac{\lambda}{\lambda'}\lambda) \Big) \Big\} \Big) \frac{q_j}{q_n}$$

$$Q_{10}^{(33)}(\pm\lambda q_3')^* = \frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c\lambda}{z}\right)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\,\frac{1-e^{-i(\pm\lambda-q_3')a}}{i(\pm\lambda-q_3')}$$

$$-\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda'a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\cdot \tag{35.20}$$

$$\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big((\varepsilon\mp1)\lambda\,\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')}-(\varepsilon+1)\lambda\,e^{\mp i\lambda a}\,\frac{e^{i\lambda'a}-e^{iq_3'a}}{i(\lambda'-q_3')}\Big)$$

$$+(\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big((\varepsilon\mp1)\lambda\,\frac{e^{i(\lambda'+q_3')a}-(e^{i\lambda'a})^2}{i(\lambda'-q_3')}-(\varepsilon\pm1)\lambda\,e^{\mp i\lambda a}\,\frac{(e^{i\lambda'a})^2e^{iq_3'a}-e^{i\lambda'a}}{i(\lambda'+q_3')}\Big)\Big\}$$

$$Q_{10}^{(33)}(q_3\pm\lambda)^* = \frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{c\lambda}{z}\right)^2(\lambda^2-\lambda'^2)\,\frac{1-e^{-i(q_3\mp\lambda)a}}{i(q_3\mp\lambda)}$$

$$-\frac{1}{\varepsilon(z)}\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda'a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\cdot \tag{35.21}$$

$$\cdot\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\Big(\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}(\varepsilon\pm1)\lambda-\frac{e^{-iq_3a}-e^{i\lambda'a}}{i(q_3+\lambda')}e^{i\lambda'a}(\varepsilon\mp1)\lambda\Big)$$

$$+(\lambda'-\varepsilon\lambda)\Big(\frac{e^{i\lambda'a}-(e^{i\lambda'a})^2e^{-iq_3a}}{i(q_3-\lambda')}e^{\pm i\lambda a}(\varepsilon\mp1)\lambda-\frac{e^{-i(q_3-\lambda')a}-(e^{i\lambda'a})^2}{i(q_3+\lambda')}(\varepsilon\pm1)\lambda\Big)\Big\}$$

Im folgenden werden diese Funktionen in folgenden Kombinationen gebraucht (Heraus-Projizieren der links- bzw. rechtsseitig longitudinalen Anteile!):

$$q_i/q_n\, Q_{40}^{(ij)'}(-\lambda q_3')^* + q_n/\lambda\, Q_{40}^{(3j)'}(-\lambda q_3')^*$$

$$= -2\lambda' \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2} \left\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} + (e^{i\lambda' a})^2 (\lambda'-\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{-i(\lambda'-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')} \right\} \frac{q_j}{q_n} \qquad (35.22)$$

$$q_i/q_n\, Q_{40}^{(i3)}(-\lambda q_3')^* + q_n/\lambda\, Q_{40}^{(33)}(-\lambda q_3')^*$$

$$= -2q_n \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2} \left\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} - (e^{i\lambda' a})^2 (\lambda'-\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{-i(\lambda'-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')} \right\} \qquad (35.23)$$

$$Q_{40}^{(ij)'}(q_3\lambda)^*\, q_i/q_n - Q_{40}^{(i3)}(q_3\lambda)^*\, q_n/\lambda$$

$$= \frac{q_j}{q_n} \cdot 2\lambda' \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2} \left\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')} - (e^{i\lambda' a})^2 (\lambda'-\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{-i(q_3+\lambda')a}}{i(q_3+\lambda')} \right\} \qquad (35.24)$$

$$Q_{40}^{(3j)'}(q_3\lambda)^*\, q_j/q_n - Q_{40}^{(33)}(q_3\lambda)^*\, q_n/\lambda$$

$$= 2q_n \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2} \left\{ (\lambda'+\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')} + (e^{i\lambda' a})^2 (\lambda'-\varepsilon\lambda) \frac{1 - e^{-i(q_3+\lambda')a}}{i(q_3+\lambda')} \right\} \qquad (35.25)$$

$$Q_{40}^{(55)}(-\lambda q_3')^*$$

$$= -2\lambda \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda+\lambda')^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')^2} \left\{ (\lambda+\lambda') \frac{1 - e^{i(\lambda'+q_3')a}}{i(\lambda'+q_3')} + (e^{i\lambda' a})^2 (\lambda-\lambda') \frac{1 - e^{-i(\lambda'-q_3')a}}{i(\lambda'-q_3')} \right\} \qquad (35.26)$$

$$Q_{40}^{(55)}(q_3\lambda)^*$$

$$= 2\lambda \frac{\lambda^2 - \lambda'^2}{(\lambda+\lambda')^2 - (e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')^2} \left\{ (\lambda+\lambda') \frac{1 - e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')} - (e^{i\lambda' a})^2 (\lambda-\lambda') \frac{1 - e^{-i(q_3+\lambda')a}}{i(q_3+\lambda')} \right\} \qquad (35.27)$$

Diese Kombinationen bestimmen - wie weiter unten ausgeführt - die Korrekturen $\delta\mathbb{Q}_{(4)}^{pp}(q,z)$, $\delta\mathbb{Q}_{(4)}^{ps}(q,z)$, $\delta\mathbb{Q}_{(4)}^{sp}(q,z)$ und $\delta\mathbb{Q}_{(4)}^{ss}(q,z)$ Diese Reflexionskoeffizienten bleiben für $a \to \infty$ sinnvoll. Es ist daher befriedigend, daß in diesen Kombinationen - anders als in den $Q_{40}^{(\mu\nu)}(-\lambda q_3')^*$, $Q_{40}^{(\mu\nu)}(q_3\lambda)^*$ selbst - eine u.U. ungedämpft/oszillierende Funktion $e^{\pm i\lambda a}$ nicht mehr vorkommt und der Limes $a \to \infty$ einfach vollzogen werden kann.

Mit diesen Funktionen hat man in die Gln. (35.1) bzw. (35.3) einzugehen, um $\delta Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')_{(\omega)}^{*}$ bzw. $\delta Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')^{*}$ zu bestimmen. Eguiluz et al.[55] haben im Rahmen des hydrodynamischen Modells für einen metallischen Halbraum zusätzlich zum gewöhnlichen Oberflächen-Plasmon "höhere Multipol-Anregungen" gefunden, wenn die Oberfläche hinreichend diffus ist. Sie entsprechen offenbar Polen von $\delta Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')^{*}$, die - anders als der Oberflächen-Plasmon-Pol - nicht auch schon Pole von $Q^{(\mu\nu)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')^{*}$ sind, wenn $\delta\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')$ die Abweichung des statischen Dichteprofils von der Stufe angibt.

Hier sollen die niedrigsten durch ein $\delta\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')$ bedingten Korrekturen*) (cf.(31.1a-d))

$$\delta Q^{\rho\rho}_{(\omega)}(q_i z)_{(\omega)} = \tfrac{1}{2} i\lambda (c^2/2)^2 \{\delta Q^{(\rho\rho)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda)^{*}_{(\omega)} + q_\nu/\lambda\, \delta Q^{(3\rho)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda)^{*}_{(\omega)} - \delta Q^{(\rho 3)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda)^{*}_{(\omega)} q_\nu/\lambda - q_\nu/\lambda\, \delta Q^{(33)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda)^{*}_{(\omega)} q_\nu/\lambda\}$$

$$\delta Q^{ss}_{(\omega)}(q_i z)_{(\omega)} = \tfrac{1}{2} i\lambda\, \delta Q^{(ss)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda)^{*}_{(\omega)} \qquad (35.28a\text{-}b)$$

interessieren. Unter Ausnutzung der Tatsache, daß die in Gl. (34.2 a-b) definierten Projektoren $\delta^{\rho}_{\mu\nu}(q_i), \delta^{s}_{\mu\nu}(q_i)$ die ungestörten Größen reduzieren, $\delta^{\rho\beta}_{\mu\beta} Q^{(\mu\beta)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')^{*} = Q^{(\mu\beta)}_{\lambda\sigma}(q_3 q_3')^{*} \delta^{\rho\beta}_{\beta\nu}$, und daß

$$G^{\circ s}_{\lambda\sigma(\mu\nu)}(q_3) = \delta^{s}_{\mu\nu} \cdot 1/(\lambda^2 - q_3^2)$$

erhält man im einzelnen

$$\begin{aligned}
\delta Q^{\rho\rho}_{(\omega)}(q_i z)_{(\omega)} = {} & \tfrac{1}{2} i\lambda (c^2/2)^2 \{\delta\tilde{Q}^{(\rho\rho)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda) + q_\nu/\lambda\, \delta\tilde{Q}^{(3\rho)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda) - \delta\tilde{Q}^{(\rho 3)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda) q_\nu/\lambda - q_\nu/\lambda\, \delta\tilde{Q}^{(33)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\lambda) q_\nu/\lambda \\
& + 1/L \sum_{\tilde{q}_3} (Q^{(\rho\beta)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\tilde{q}_3)^{*} + q_\nu/\lambda\, Q^{(3\beta)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\tilde{q}_3)) G^{\circ\rho}_{\sigma(\mu\nu)}(\tilde{q}_3) (\delta\tilde{Q}^{(\nu\rho)}_{\lambda\sigma}(\tilde{q}_3\lambda) - \delta\tilde{Q}^{(\nu 3)}_{\lambda\sigma}(\tilde{q}_3\lambda) q_\nu/\lambda) \\
& + 1/L \sum_{\tilde{q}_3'} (\delta\tilde{Q}^{(\rho\beta)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\tilde{q}_3') + q_\nu/\lambda\, \delta\tilde{Q}^{(3\beta)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\tilde{q}_3')) G^{\circ\rho}_{\sigma\sigma(\mu\nu)}(\tilde{q}_3') (Q^{(\nu\rho)}_{\lambda\sigma}(\tilde{q}_3'\lambda)^{*} - Q^{(\nu 3)}_{\lambda\sigma}(\tilde{q}_3'\lambda)^{*} q_\nu/\lambda) \\
& + 1/L^2 \sum_{\tilde{q}_3 \tilde{q}_3'} (Q^{(\rho\beta)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\tilde{q}_3)^{*} + q_\nu/\lambda\, Q^{(3\beta)}_{\lambda\sigma}(-\lambda\tilde{q}_3)) G^{\circ\rho}_{\sigma(\beta\nu)}(\tilde{q}_3) \delta\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\lambda\sigma}(\tilde{q}_3\tilde{q}_3') G^{\circ\rho}_{\sigma(\nu\sigma)}(\tilde{q}_3') \cdot \\
& \cdot (Q^{(\sigma\rho)}_{\lambda\sigma}(\tilde{q}_3'\lambda) - Q^{(\sigma 3)}_{\lambda\sigma}(\tilde{q}_3'\lambda) q_\nu/\lambda)\} \qquad (35.29
\end{aligned}$$

*) Die Möglichkeit, ATR-Messungen in Modulations-Spektroskopie zu betreiben - z.B. an der Metall-Elektrolyt-Grenzfläche in der elektrochemischen Zelle mit variablem Elektroden-Potential - würde es allerdings gerade inter-

und

$$\delta\mathcal{Q}^{ss}_{(\iota)}(q_i z)_{(o)} = \tfrac{1}{2}i\lambda\Big\{\delta\tilde{Q}^{(ss)}_{\iota o}(-\lambda\bar{q}_3)+\tfrac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3} Q^{(ss)}_{\iota o}(-\lambda\bar{q}_3)^{*}\,1/(\lambda^2-\bar{q}_3^2)\,\delta\tilde{Q}^{(ss)}_{\iota o}(\bar{q}_3\lambda)+\tfrac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3'}\delta\tilde{Q}^{(ss)}_{\iota o}(-\lambda\bar{q}_3')\,1/(\lambda^2-\bar{q}_3'^2)\,Q^{(ss)}_{\iota o}(\bar{q}_3'\lambda)^{*}$$

$$+\tfrac{1}{L^2}\sum_{\bar{q}_3\bar{q}_3'} Q^{(ss)}_{\iota o}(-\lambda\bar{q}_3)^{*}\,1/(\lambda^2-\bar{q}_3^2)\,\delta\tilde{Q}^{(ss)}_{\iota o}(\bar{q}_3\bar{q}_3')\,1/(\lambda^2-\bar{q}_3'^2)\,Q^{(ss)}_{\iota o}(\bar{q}_3'\lambda)^{*}\Big\}. \quad (35.29b)$$

Falls die Störung $\delta\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\iota o}(q_3 q_3')$ nicht durch $\delta^{f}_{\mu\nu}$ und $\delta^{s}_{\mu\nu}$ reduziert wird, führt sie außerdem noch zu ganz analog gebildeten Korrekturen $\delta\mathcal{Q}^{ps}_{(\iota)}(q_i z)_{(o)}$ und $\delta\mathcal{Q}^{sp}_{(\iota)}(q_i z)_{(o)}$.

Die Ausdrücke (35.22-27)- (35.29) in Verbindung mit Gl. (34.3a-b) führen auf die Ausdrücke

$$(Q^{(pp)}_{\iota o}(-\lambda q_3)^{*}+q_\mu/\lambda\, Q^{(3\mu)}_{\iota o}(-\lambda q_3)^{*})\,G^{op}_{o o(p3)}(q_3)$$

$$=-2\,\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\Big(\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3)a}}{i(\lambda'+q_3)}+(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(\lambda'-q_3)a}}{i(\lambda'-q_3)}\Big\}\Big(\frac{c\lambda' c_\iota}{z^2}\Big)\lambda$$

$$-\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3)a}}{i(\lambda'+q_3)}-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(\lambda'-q_3)a}}{i(\lambda'-q_3)}\Big\}\Big(\frac{cq_\mu}{z}\Big)^2 q_3\Big)\,\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\,\frac{q_i'}{q_o}$$

$$(Q^{(pp)}_{\iota o}(-\lambda q_3)^{*}+q_\mu/\lambda\, Q^{(3\mu)}_{\iota o}(-\lambda q_3)^{*})\,G^{op}_{o o(p3)}(q_3)$$

$$=2\,\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}\Big(\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3)a}}{i(\lambda'+q_3)}+(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(\lambda'-q_3)a}}{i(\lambda'-q_3)}\Big\}\,\frac{c\lambda' c q_\mu}{z^2}\,q_3$$

$$-\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{i(\lambda'+q_3)a}}{i(\lambda'+q_3)}-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(\lambda'-q_3)a}}{i(\lambda'-q_3)}\Big\}q_\mu\Big(1-\Big(\frac{cq_3}{z}\Big)^2\Big)\Big)\,\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}$$

$$G^{op}_{o o(iv)}(q_3)\,(Q^{(vp)}_{\iota o}(q_3\lambda)^{*}-Q^{(v3)}_{\iota o}(q_3\lambda)^{*}q_\mu/\lambda)$$

$$=\frac{q_i'}{q_o}\,\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\Big(\lambda\,\frac{c\lambda c\lambda'}{z^2}\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3+\lambda')a}}{i(q_3+\lambda')}\Big\}$$

$$-q_3\Big(\frac{cq_\mu}{z}\Big)^2\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}+(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3+\lambda')a}}{i(q_3+\lambda')}\Big\}\Big)\cdot 2\,\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)}$$

und

$$G^{op}_{o o(3v)}(q_3)\,(Q^{(vp)}_{\iota o}(q_3\lambda)^{*}-Q^{(v3)}_{\iota o}(q_3\lambda)^{*}q_\mu/\lambda)$$

$$=-\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\Big(q_3\,\frac{cq_\mu c\lambda'}{z^2}\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3+\lambda')a}}{i(q_3+\lambda')}\Big\}$$

$$-q_\mu\Big(1-\Big(\frac{cq_3}{z}\Big)^2\Big)\Big\{(\lambda'+\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3-\lambda')a}}{i(q_3-\lambda')}+(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)\,\frac{1-e^{-i(q_3+\lambda')a}}{i(q_3+\lambda')}\Big\}\Big)\cdot 2\,\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{(\lambda'+\varepsilon\lambda)^2-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda'-\varepsilon\lambda)^2}$$

---

essant machen, das volle $\delta\mathcal{Q}$ zu bestimmen, da in ATR i.w. nur die Lage der Pole gemessen wird.

wie sie zur Bestimmung von $\delta\tilde{Q}^{\mu\rho}_{(1)}(q_i z)_{(0)}$ benötigt werden. Setzt man sie ein in Gl. (35.29a) und ebenso die Ausdrücke (35.26) bzw. (35.27) für $Q^{(ss)}_{\mu 0}(-\lambda\, q_3')^*$ bzw. $Q^{(ss)}_{\mu 0}(q_3\lambda)^*$ in Gl. (35.29b), so hat man nach Spezifikation der Leitfähigkeit $\sigma(z)$ - cf. Gl. (35.4) - und der Korrektur $\delta\tilde{Q}^{(\mu\nu)}_{\mu 0}(q_3 q_3')$ für $\delta\tilde{Q}^{\rho\rho}_{(1)}(q_i z)_{(0)}$ und $\delta\tilde{Q}^{ss}_{(1)}(q_i z)_{(0)}$ explizite und der (numerischen) Auswertung zugängliche Formeln.

Wegen der Unförmigkeit des Ausdrucks soll diese explizite Formel für $\delta\tilde{Q}^{\rho\rho}_{(1)}(q_i z)_{(0)}$ nur im Fall der dicken Schicht ($a \approx L$) angeschrieben werden. Dann hat man

$$\delta\tilde{Q}^{\rho\rho}_{0}(q_i z)_{(0)} = \tfrac{1}{2} i\lambda (c\lambda/z)^2 \{\delta\tilde{Q}^{(\rho\rho)}_{\mu 0}(-\lambda\lambda) + q_u/\lambda\, \delta\tilde{Q}^{(3\rho)}_{\mu 0}(-\lambda\lambda) - \delta\tilde{Q}^{(\rho 3)}_{\mu 0}(-\lambda\lambda) q_u/\lambda - q_u/\lambda\, \delta\tilde{Q}^{33}_{\mu 0}(-\lambda\lambda) q_u/\lambda$$

$$+ \frac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3} 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda} \frac{1}{\lambda'+\bar{q}_3} \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda - \left(\frac{c q_u}{z}\right)^2 \bar{q}_3 \right) \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2} \left(\delta\tilde{Q}^{(\rho\rho)}_{\mu 0}(\bar{q}_3\lambda) - \delta\tilde{Q}^{(\rho 3)}_{\mu 0}(\bar{q}_3\lambda) q_u/\lambda\right)$$

$$- \frac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3} 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda} \frac{1}{\lambda'+\bar{q}_3} \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\bar{q}_3 - \left(1-\left(\frac{c\bar{q}_3}{z}\right)^2\right)\lambda \right) \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2} \frac{q_u}{\lambda} \left(\delta\tilde{Q}^{(3\rho)}_{\mu 0}(\bar{q}_3\lambda) - \delta\tilde{Q}^{(33)}_{\mu 0}(\bar{q}_3\lambda) \frac{q_u}{\lambda}\right)$$

$$- \frac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3} \left(\delta\tilde{Q}^{(\rho\rho)}_{\mu 0}(-\lambda q_3) + \frac{q_u}{\lambda}\delta\tilde{Q}^{(3\rho)}_{\mu 0}(-\lambda\bar{q}_3)\right) \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2} \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda - \left(\frac{c q_u}{z}\right)^2 \bar{q}_3 \right) \frac{1}{\bar{q}_3-\lambda'} \cdot 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}$$

$$+ \frac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3} \left(\delta\tilde{Q}^{(\rho 3)}_{\mu 0}(-\lambda\bar{q}_3) + \frac{q_u}{\lambda}\delta\tilde{Q}^{(33)}_{\mu 0}(-\lambda\bar{q}_3)\right) \frac{q_u}{\lambda} \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2} \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\bar{q}_3 - \left(1-\left(\frac{c\bar{q}_3}{z}\right)^2\right)\lambda \right) \frac{1}{\bar{q}_3-\lambda'} \cdot 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}$$

$$- \frac{1}{L^2}\sum_{\bar{q}_3\bar{q}_3'} 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda} \frac{1}{\lambda'+\bar{q}_3} \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda - \left(\frac{c q_u}{z}\right)^2 \bar{q}_3 \right) \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2} \delta\tilde{Q}^{(\rho\rho)}_{\mu 0}(\bar{q}_3\bar{q}_3') \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3'^2}$$

$$\cdot \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda - \left(\frac{c q_u}{z}\right)^2 \bar{q}_3' \right) \frac{1}{\bar{q}_3'-\lambda'} \cdot 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}$$

$$+ \frac{1}{L^2}\sum_{\bar{q}_3\bar{q}_3'} 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda} \frac{1}{\lambda'+\bar{q}_3} \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda - \left(\frac{c q_u}{z}\right)^2 \bar{q}_3 \right) \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2} \delta\tilde{Q}^{(\rho 3)}_{\mu 0}(\bar{q}_3\bar{q}_3') \frac{q_u}{\lambda} \cdot \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3'^2} \cdot$$

$$\cdot \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\bar{q}_3' - \left(1-\left(\frac{c\bar{q}_3'}{z}\right)^2\right)\lambda \right) \frac{1}{\bar{q}_3'-\lambda'} \cdot 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}$$

$$+ \frac{1}{L^2}\sum_{\bar{q}_3\bar{q}_3'} 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda} \frac{1}{\lambda'+\bar{q}_3} \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\bar{q}_3 - \left(1-\left(\frac{c\bar{q}_3}{z}\right)^2\right)\lambda \right) \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2} \frac{q_u}{\lambda} \delta\tilde{Q}^{(3\rho)}_{\mu 0}(\bar{q}_3\bar{q}_3') \frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3'^2}$$

$$\cdot \left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda - \left(\frac{c q_u}{z}\right)^2 \bar{q}_3' \right) \frac{1}{\bar{q}_3'-\lambda'} \cdot 2i \frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}$$

(35.30a)

$$-\frac{1}{L^2}\sum_{\bar{q}_3\bar{q}_3'} 2i\,\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}\,\frac{1}{\lambda'+\bar{q}_3}\left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\bar{q}_3-\left(1-\left(\frac{c\bar{q}_3}{z}\right)^2\right)\lambda\right)\frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2}\,\frac{q_\mu}{\lambda}\,\delta\tilde{Q}_{\infty}^{(33)}(\bar{q}_3\bar{q}_3')\,\frac{q_\nu}{\lambda}\,\frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3'^2}$$

$$\cdot\left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\bar{q}_3'-\left(1-\left(\frac{c\bar{q}_3'}{z}\right)^2\right)\lambda\right)\frac{1}{\bar{q}_3'-\lambda'}\cdot 2i\,\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}\Big\}$$

Die Formel für $\delta Q_{(\infty)}^{ss}(q_\mu z)_{(\infty)}$ ist selbst für endliche Schichtdicke a einfacher:

$$\delta Q_{(\infty)}^{ss}(q_\mu z)=\tfrac{1}{2}i\lambda\{\delta Q_{\infty}^{(ss)}(-\lambda\lambda) \qquad (35.30b)$$

$$+2i\lambda\,\frac{Q_o^{ss}(q_\mu z)}{1-(Q_o^{ss}(q_\mu z)e^{i\lambda' a})^2}\,\frac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3}\left(\left(\lambda+\lambda'\right)\frac{1-e^{i(\lambda'+\bar{q}_3)a}}{\lambda'+\bar{q}_3}+(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')\frac{1-e^{-i(\lambda'-\bar{q}_3)a}}{\lambda'-\bar{q}_3}\right)\frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2}\,\delta\tilde{Q}_{\infty}^{(ss)}(\bar{q}_3\lambda)$$

$$-2i\lambda\,\frac{Q_o^{ss}(q_\mu z)}{1-(Q_o^{ss}(q_\mu z)e^{i\lambda' a})^2}\,\frac{1}{L}\sum_{\bar{q}_3}\,\delta\tilde{Q}_{\infty}^{(ss)}(-\lambda\bar{q}_3)\,\frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2}\left(\left(\lambda+\lambda'\right)\frac{1-e^{-i(\bar{q}_3-\lambda')a}}{\bar{q}_3-\lambda'}-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')\frac{1-e^{-i(\bar{q}_3+\lambda')}}{\bar{q}_3+\lambda'}\right)$$

$$+(2\lambda)^2\left(\frac{Q_o^{ss}(q_\mu z)}{1-(Q_o^{ss}(q_\mu z)e^{i\lambda' a})^2}\right)^2\frac{1}{L^2}\sum_{\bar{q}_3\bar{q}_3'}\left(\left(\lambda+\lambda'\right)\frac{1-e^{i(\lambda'+\bar{q}_3)a}}{\lambda'+\bar{q}_3}+(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')\frac{1-e^{i(\lambda'-\bar{q}_3)a}}{\lambda'-\bar{q}_3}\right)\frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3^2}\,\delta\tilde{Q}_{\infty}^{(ss)}(\bar{q}_3\bar{q}_3')$$

$$\frac{1}{\lambda^2-\bar{q}_3'^2}\left(\left(\lambda+\lambda'\right)\frac{1-e^{-i(\bar{q}_3'-\lambda')a}}{\bar{q}_3'-\lambda'}-(e^{i\lambda' a})^2(\lambda-\lambda')\frac{1-e^{-i(\bar{q}_3'+\lambda')}}{\bar{q}_3'+\lambda'}\right)\Big\}$$

Als Beispiel soll der Einfluß einer Abweichung des Dichteprofils von der Kastenform (Stufenform), wie sie bei der nullten Näherung Gl. (35.4) vorausgesetzt war, also - cf. Gl. (26.12) - eines

$$\delta\tilde{Q}_{\infty}^{(\mu\nu)}(q_3q_3')=\frac{\delta\omega_p^2(q_3q_3')}{c^2}\,\delta_{\mu\nu}=\frac{e^2}{c^2 m}\,\delta n(q_3-q_3')\,\delta_{\mu\nu}$$

näher betrachtet werden. Dieser Spezialfall läßt sich natürlich auch mit den Methoden der Theorie der "stratified media" (z.B.[56] oder[57]) behandeln, indem das kontinuierliche Profil der lokalen D.K. $\varepsilon(z;x_3)$ durch eine Treppenfunktion $\varepsilon(z,x_{3i}),\ i=1,\dots,N$, - also durch einen Satz von N Platten der jeweiligen D.K. $\varepsilon_i(z):=\varepsilon(z;x_{3i})$ - genähert wird. Die vorgelegte Theorie vermeidet diese Einführung einer Vielzahl von scharfen Grenzflächen. Darüber hinaus läßt sie sich auf sehr viel allgemeinere Störungen $\delta\tilde{Q}_{\infty}^{(\mu\nu)}(q_3q_3')$ anwenden.

Zum Beispiel läßt sich die in Abschnitt 34.b p.134bestimmte Korrektur an den Fresnelschen Formeln durch die durch Plasma-Schwingungen bedingte Nicht-Lokalität der longitudinalen D.K. auch auf diesem Wege herleiten.

In dem vorgestellten Spezialfall hat man nun einfacher:

$$\delta Q_o^{pp}(q_i z)_{(\omega)} = \tfrac{1}{2} i\lambda (\lambda/2)^2 \{ \delta\omega_p^2(-\lambda\lambda)(1-q_3^2/\lambda^2)$$

$$+2i\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}\cdot\frac{1}{L}\sum_{q_3}\frac{1}{\lambda'+q_3}\left(\left\{\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda-\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2 q_3\right\}+\left\{\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)q_3-\left(1-\left(\frac{cq_3}{z}\right)^2\right)\lambda\right\}\frac{q_{\parallel}^2}{\lambda^2}\right)\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\,\delta\omega_p^2(q_3\lambda)$$

$$-2i\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}\cdot\frac{1}{L}\sum_{q_3}\delta\omega_p^2(-\lambda q_3)\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\left(\left\{\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda-\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2 q_3\right\}-\left\{\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)q_3-\left(1-\left(\frac{cq_3}{z}\right)^2\right)\lambda\right\}\frac{q_{\parallel}^2}{\lambda^2}\right)\frac{1}{q_3-\lambda'}-$$

$$-\left(2i\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}\right)^2\frac{1}{L^2}\sum_{q_3 q_3'}\frac{1}{\lambda'+q_3}\left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda-\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2 q_3\right)\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\,\delta\omega_p^2(q_3 q_3')\frac{1}{\lambda^2-q_3'^2}\left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)\lambda-\left(\frac{cq_{\parallel}}{z}\right)^2 q_3'\right)\frac{1}{q_3'-\lambda}$$

$$-\left(2i\frac{\lambda^2-\lambda'^2}{\lambda'+\varepsilon\lambda}\right)^2\frac{1}{L^2}\sum_{q_3 q_3'}\frac{1}{\lambda'+q_3}\left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)q_3-\left(1-\left(\frac{cq_3}{z}\right)^2\right)\lambda\right)\frac{q_{\parallel}/\lambda}{\lambda^2-q_3^2}\,\delta\omega_p^2(q_3 q_3')\frac{q_{\parallel}/\lambda}{\lambda^2-q_3'^2}\cdot$$

$$\cdot\left(\left(\frac{c\lambda' c\lambda}{z^2}\right)q_3-\left(1-\left(\frac{cq_3}{z}\right)^2\right)\lambda\right)\frac{1}{q_3'-\lambda'}\Big\}$$

(35.31a)

und - ebenfalls im Limes dicker Schichten -

$$\delta Q_o^{ss}(q_i z)_{(\omega)} = \tfrac{1}{2} i\lambda\cdot 1/c^2\{\delta\omega_p^2(-\lambda\lambda)$$

$$-2\lambda(\lambda-\lambda')\frac{1}{iL}\sum_{q_3}\frac{1}{\lambda'+q_3}\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\,\delta\omega_p^2(q_3\lambda)+2\lambda(\lambda-\lambda')\frac{1}{iL}\sum_{q_3}\delta\omega_p^2(-\lambda q_3)\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\frac{1}{q_3-\lambda'}$$

$$-(2\lambda(\lambda-\lambda'))^2\frac{1}{(iL)^2}\sum_{q_3 q_3'}\frac{1}{\lambda'+q_3}\frac{1}{\lambda^2-q_3^2}\,\delta\omega_p^2(q_3 q_3')\frac{1}{\lambda^2-q_3'^2}\frac{1}{q_3'-\lambda'}\Big\} \qquad (35.31b)$$

36. Reflexion an einer einfachen Modell-Oberfläche

Ein einfaches Modell einer diffusen Oberfläche ist durch das stetig differenzierbare Elektronen-Dichteprofil

$$n(x_3)=\begin{cases} n\cdot\tfrac{1}{2}\,e^{\alpha x_3} & x_3\le 0 \\ n\,(1-\tfrac{1}{2}\,e^{-\alpha x_3}) & x_3\ge 0 \end{cases}$$

beschrieben. Unter der Abklingkonstante α stelle man sich etwa den Fermi-Thomas-Wellenvektor k_{TF} für das entartete Elektronengas vor ($k_{TF}^2 = 3\omega_p^2/v_F^2$). Es folgt die Fourier-Transformierte

$$\delta\omega_p^2(q_3 q_3') = \omega_p^2 \frac{i(q_3 - q_3')}{(q_3 - q_3')^2 + \alpha^2} \quad ,$$

so daß

$$\delta Q_o^{ss}(q_{||} z)_{(\omega)} = \frac{1}{2i\lambda} \frac{\omega_p^2}{c^2} \Big\{ \frac{-2i\lambda}{(2\lambda)^2 + \alpha^2} + 2\lambda(\lambda - \lambda') \frac{1}{L} \sum_{q_3} \frac{1}{q_3 + \lambda'} \frac{1}{q_3 + \lambda} \frac{1}{(q_3 - \lambda)^2 + \alpha^2}$$

$$+ 2\lambda(\lambda - \lambda') \frac{1}{L} \sum_{q_3} \frac{1}{(q_3 + \lambda)^2 + \alpha^2} \frac{1}{q_3 - \lambda} \frac{1}{q_3 - \lambda'}$$

$$+ (2\lambda(\lambda - \lambda'))^2 \frac{1}{L^2} \sum_{q_3 q_3'} \frac{1}{\lambda' + q_3} \frac{1}{\lambda^2 - q_3^2} \frac{i(q_3 - q_3')}{(q_3 - q_3')^2 + \alpha^2} \frac{1}{\lambda^2 - q_3^2} \frac{1}{q_3' - \lambda'} \Big\}$$

$$= \frac{\omega_p^2}{c^2} \Big\{ -(1 - (Q_o^{ss}(q_{||} z))^2) \frac{1}{(2\lambda)^2 + \alpha^2} + Q_o^{ss}(q_{||} z) \cdot \frac{1}{(\lambda' + i\alpha)^2 - \lambda^2} \frac{\lambda}{i\alpha + 2\lambda'}$$

$$+ \frac{\lambda - \lambda'}{2i\alpha} \Big(\frac{1}{i\alpha + 2\lambda} \frac{1}{i\alpha + \lambda + \lambda'} + Q_o^{ss}(q_\infty z) \frac{1}{i\alpha - 2\lambda} \frac{1}{i\alpha - \lambda + \lambda'} \Big) \Big\}$$

Für einschlägige Metalle ist $k_{FT} \approx 10^8\ cm^{-1}$ also etwa 1000 mal so groß wie Wellenvektor im Vakuum und Abklingkonstante im Metall, selbst wenn man UV-Licht ($\omega \approx \omega_p$) wählt. Daher folgt mit Entwicklung nach Potenzen von $1/\alpha$ bis zur dritten Ordnung

$$\delta Q_o^{ss}(q_{||} z)_{(\omega)} = -\frac{v_F^2}{3c^2} \Big\{ (1 - (Q_o^{ss}(q_{||} z))^2) + 2\frac{\lambda}{i\alpha} Q_o^{ss}(q_\infty z) \Big\}$$

Da $v_F \approx 10^8\ cm/s$ typisch für Metalle hoher Elektronendichte ist, bedeutet dies eine sehr kleine Korrektur von der Ordnung 10^{-6}.

Zusammenfassung

In dem Maße, in dem die räumliche Ausdehnung von (lokalisierten) physikalischen Phänomenen vergleichbar wird der Dicke der Randschicht begrenzter Medien, wird es notwendig, die Physik dieser Inhomogenitätsschichten mikroskopisch und ohne Rekurs auf unrealistische Modelle wie das einer mathematischen "scharfen" Oberfläche zu beschreiben. Das gelingt durch eine - aus der Streu-Theorie vertraute - "asymptotische" Betrachtung der reflektierten und transmittierten Felder, die das von (schwachen) elektromagnetischen Testfeldern getroffene begrenzte Medium in den Außenraum sendet. Bei Beschränkung auf "lineare Optik" - also keine (Raman-) Lichtstreuung u.ä. - hängen erstere von diesen über 16 (lineare) Reflexions- und Transmissionskoeffizienten (RTK) ab. Diese enthalten alle relevante, d.h. in den (asymptotischen) Außenräumen zu empfangende Information. Sie sind - bis auf Konstanten - gegeben durch gewisse Werte der Differenz aus dem rein transversalen Teil der Stromdichte-Korrelationsfunktionen (lineare Responsfunktionen, Kubo-Formeln) und der lokalen Plasma-Frequenz $\omega_p^2(\tau)$, in einer einfachsten Hochfrequenz-Näherung nur durch letztere (p.14).

Diese Verknüpfung erklärt die RTK zugleich als Funktionen der komplexen Frequenz; ihr analytisches Verhalten ist das von der kausalen Green-Funktion her bekannte. Spektral-Darstellung, Kramers-Kronig-Relationen und Summenregeln könnten nützlich sein z.B. bei Phasenübergängen "normal-supraleitend". Die Zerlegung der Korrelationsfunktionen (und der lokalen Plasmafrequenz) nach den irreduziblen Darstellungen der "ebenen Punktgruppe" des vorliegenden Systems erweist die

RTK als Skalare bzw. Pseudo-Skalare dieser Gruppe.

"Oberflächen-Polaritonen" sind in ganz allgemeiner Weise definiert durch Pole der RTK dicht unterhalb der reellen Frequenz-Achse; Lage des Poles und zugehörige Residuen der RTK bestimmen die Phänomenologie solcher Oberflächen-Wellen: Frequenz, Dämpfung, Oszillatorstärke, Energie-Inhalt und thermische Fluktuation. Demgemäß sind die Pole der RTK die eigentlichen Meßgrößen der ATR-Spektroskopie.

Aus den RTK lassen sich als alternative Beschreibung Oberflächen-Impedanzen definieren. Ihre Verwendung erscheint i.a. weniger vorteilhaft als die der RTK: (i) Sie hängen von zwei (je nach Experiment zu spezifizierenden) Parametern (Einstrahlbedingungen) ab; (ii) ihr analytisches Verhalten ist problematischer. Nur für das Modell einer "strikten Oberfläche" hat ihre Verwendung technische Vorteile.

Zur Bestimmung der Differenz Q^{*}_{10} von Stromdichte-Korrelationsfunktionen und lokaler Plasma-Frequenz wird die Dynamik des Systems spezifiziert als die eines (zweikomponentigen) Systems von Coulombisch wechselwirkenden Elektronen und (transversalen) Photonen vor einem starren Ionen-Potential. Ein - einfacher erscheinendes - (einkomponentiges) System von Elektronen mit (skalarer) Coulomb-Wechselwirkung und (transversaler) Biot-Savart-Wechselwirkung führt - wie gezeigt - zu irrigen Aussagen; es beschreibt den diamagnetischen Strom unzureichend. Eine Re-Formulierung der Dynamik in einem (endlichen) Funktionalgleichungs-System zeigt ganz allgemein, daß jene Differenz allein schon durch die "Photon-Selbstenergie" Q^{T}_{10} vermittels einer Art Dyson-Gl. gegeben ist.

Für $Q^{\top}_{10}$ hat man - geleitet durch die Quasi-Anschaulichkeit der Diagramm-Sprache - Näherungen zu konzipieren. Dies geschieht in einer RPA in Verbindung mit einer Entwicklung nach e/c bis zur zweiten Ordnung und zwar im Respons des Elektronen-Systems (physikalisch: v^2/c^2-Entwicklung für ein Metall) aber nicht in der Propagation der Photonen. Dieses RPA-$Q^{\top}_{10}$ hängt von der Dynamik des Systems nur noch über die Ein-Elektron-Funktion G_{α} ab, für die eine elektrostatische Näherung genügt; es ist der transversale Teil der durch die Coulomb-Wechselwirkung "angezogenen" Differenz $\tilde{Q}_{10}$ von "freien" Stromdichte-Korrelationsfunktion und lokaler Plasma-Frequenz.

$\tilde{Q}_{10}$ ist - bis auf Faktoren - die RPA-Leitfähigkeit und knüpft an die (semi-) klassische Boltzmann-Näherung und gewisse Ein-Teilchen-Behandlungen an. Das stärker lokalisierte $\tilde{Q}_{10} - Q^{\top}_{10}$ ist langreichweitig - erlaubt die Einführung des Modells einer für die Elektronen undurchdringlichen "strikten" Oberfläche, die die betrachtete Schicht in endlichem Abstand einhüllt. Einschränkung der Gln. auf ein "Grundgebiet" und periodisch/antiperiodische Fortsetzung simuliert mehr oder weniger ein homogenes Medium - je nach Güte der Beschreibung der Randschicht.

Erstmals können die Stromdichte-Korrelationsfunktionen angegeben werden. Sie enthalten die Optik von (natürlich oder magnetisch) anisotropen Schichten mit Berücksichtigung der räumlichen Dispersion. Es ist damit möglich, zur Angabe der Dispersionsrelationen einer nun größeren Vielfalt von Oberflächen-Polaritonen über die lokale Theorie hinauszugehen. Das ist für das Oberflächen-

Plasmon-Polariton im Magnetfeld (Faraday-Geometrie) durchgeführt. Es zeigt sich neben der Landau-Dämpfung eine weitere (stoßfreie) "Zyklotron-Dämpfung". Ihre Stärke kann durch eine (unmittelbar mögliche) numerische Auswertung der Dispersionsrelation bestimmt werden.

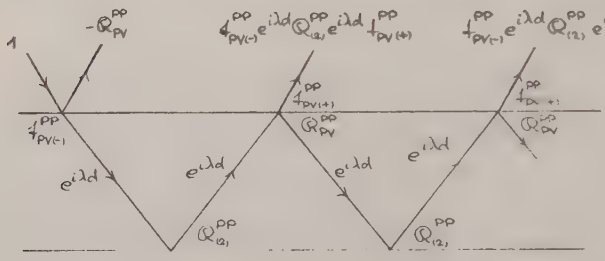
Die Ausdrücke für die Reflektivität einer Metallschicht ("Jellium") bzw. eines metallischen Halbraumes reproduzieren in den jeweiligen Konkretisierungen die von Reuter und Sondheimer[53] bzw. von Kliewer und Fuchs[35] bzw. korrigieren denjenigen von Forstmann[49] geringfügig.

Den Effekt der (quantenmechanischen) Friedel-Oszillationen am Rande zeigt (Einsetzen einer einfachen RPA-Ein-Elektron-Funktion in $\tilde{Q}_{10}$) eine elektrostatische Näherung für die Oberflächen-Impedanz Z^{pp}. Die durch sie bestimmte Dispersionsrelation des Oberflächen-Plasmons ist identisch mit der von Heger und Wagner[48] auf anderem Wege hergeleiteten.

Die Anwendung einer hier entwickelten Störungsrechnung 1. Ordnung für Korrekturen an der Photon-Selbstenergie bzw. Leitfähigkeit erlaubt, den bei diesen Modellen der Inhomogenitätsschicht am Rande gemachten Fehler abzuschätzen. Zum Beispiel liefert eine einfache stetige Modell-Oberfläche für ein Metall eine Korrektur an dem Fresnelschen Reflexionskoeffizienten in der Größenordnung von höchstens $(v_F/c)^2$.

Anhang

Die optische Situation bei der oben skizzierten einfachsten Anordnung zur ATR-Messung ähnelt den Reflexionsverhältnissen an einer asymmetrischen Gehrcke-Platte:



Es folgt für den Reflexionskoeffizienten $R^{pp}_{PVS}(q_{\parallel}, z)$:

$$R^{pp}_{PVS} = -R^{pp}_{PV} + t^{pp}_{PV(-)} e^{i\lambda d}\{R^{pp}_{(2)} + R^{pp}_{(2)} e^{i\lambda d} R^{pp}_{PV} e^{i\lambda d} R^{pp}_{(2)} + R^{pp}_{(2)} e^{i\lambda d} R^{pp}_{PV} e^{i\lambda d} R^{pp}_{(2)} e^{i\lambda d} R^{pp}_{PV} e^{i\lambda d} R^{pp}_{(2)} + \dots\} t^{pp}_{PV(+)}$$

$$= -R^{pp}_{PV} + t^{pp}_{PV(-)} t^{pp}_{PV(+)} \cdot R^{pp}_{(2)} (e^{i\lambda d})^2 \{1 + R^{pp}_{PV} R^{pp}_{(2)} (e^{i\lambda d})^2 + (R^{pp}_{PV} R^{pp}_{(2)} (e^{i\lambda d})^2)^2 + \dots\}$$

$$= -R^{pp}_{PV} + \frac{t^{pp}_{PV(-)} t^{pp}_{PV(+)} R^{pp}_{(2)} (e^{i\lambda d})^2}{1 - R^{pp}_{PV} R^{pp}_{(2)} (e^{i\lambda d})^2} .$$

Dabei ist aus Stetigkeitsgründen

$$t^{pp}_{PV(-)} = 1 - R^{pp}_{PV} \quad \text{und} \quad t^{pp}_{PV(+)} = 1 + R^{pp}_{PV} ,$$

so daß folgt

$$R^{pp}_{PVS}(q_{\parallel}, z) = \frac{-R^{pp}_{PV}(q_{\parallel}, z) + R^{pp}_{(2)}(q_{\parallel}, z)(e^{i\lambda d})^2}{1 - R^{pp}_{PV} R^{pp}_{(2)} (e^{i\lambda d})^2} .$$

Dabei ist etwa ($\lambda' = \sqrt{(nz/c)^2 - q_{\parallel}^2}$):

$$R^{pp}_{PV} = \frac{\lambda' - n^2\lambda}{\lambda' + n^2\lambda}$$

Literaturverzeichnis

1 P.M. Platzman, P.A. Wolff "Waves and Interactions in Solid State Plasmas" New York, London 1973

2 H. Kanazawa Progr. Theor. Phys. 26, 851 (1961)

3 P.C. Martin "Measurements and Correlation Functions" New York 1968

4 F. Rühs "Funktionentheorie" Berlin 1962

5 V. Peuckert Z. Physik 241, 191 (1971)

6 N. Marschall, B. Fischer, H.J. Queisser Phys. Rev. Lett. 27, 95 (1971)
P.M. van den Berg, J.C.M. Borburgh Appl. Phys. 3, 55 (1974)
I. Pockrand Phys. Lett. 49A, 259 (1974)

7 S.G. Louie, J.R. Chelikowsky, M.L. Cohen Phys. Rev. Lett. 34, 155 (1975)
S.L. Adler Phys. Rev. 126, 413 (1962)
N. Wiser Phys. Rev. 129, 62 (1963)

8 L.D. Landau, I.M. Lifschitz "Elektrodynamik der Kontinua" Berlin 1967

9 P.C. Martin Phys. Rev. 161, 143 (1967)

10 G. Brändli Phys. Rev. Lett. 28, 159 (1972); Phys. Rev. B9, 342 (1974)

11 A. Mooradian, G.B. Wright Phys. Rev. Lett. 16, 999 (1966)

12 M. Ya. Azbel, E.A. Kaner J. Phys. Chem. Solids 6, 113 (1958)

13 R.E. Prange, T.W. Nee Phys. Rev. 168, 779 (1968)

14 V.F. Gantmacher, E.A. Kaner Soviet Phys.-JETP 21, 1053 (1965)

15 T.W. Griswold, A.F. Kip, C. Kittel Phys. Rev. 88, 951 (1952)
G. Feher, A.F. Kip Phys. Rev. 98, 337 (1955)

16 R.E. Collin "Field Theory of Guided Waves"
New York 1960

17 A.S. Barker Jr. Surface Sci. 34, 62 (1973)

18 G.S. Agarwal Phys. Rev. B8, 4768 (1973)

19 J. Nkoma, R. Loudon, A.S. Barker, Jr.
J. Phys. C7, 3547 (1974)

20 J.M. Elson, R.H. Ritchie Surface Sci. 30, 178 (1972)

21 G.B. Airy Philos. Mag. (3) Bd. 2, 20 (1833)

22 R.H. Ritchie, H.B. Eldridge Phys. Rev. 126, 1935 (1962)

23 K.L. Kliewer, R. Fuchs Phys. Rev. 144, 495 (1966)

24 A. Otto Z. Physik 216, 398 (1968)

25 R.W. Alexander, G.S. Kovener, R.J. Bell
Phys. Rev. Lett. 32, 154 (1974)

26 D.F. DuBois in "Lectures in theoretical physics IX C"
ed. W.E. Brittin et al. New York 1967

27 L.P. Kadanoff, G. Baym "Quantum Statistical Mechanics"
New York 1962
C. De Dominicis, P.C. Martin J. Math. Phys. 5, 14 (1964)

28 H. Hermeking Z. Physik 253, 379 (1972);
J. Phys. C 6, 2898 (1973)

29 D. Wagner "Einführung in die Theorie des Magnetismus"
Braunschweig 1966

30 D. Bohm, D. Pines Phys. Rev. 82, 625 (1951)

31 D. Pines, P. Nozières "The Theory of Quantum Liquids"
New York, Amsterdam 1966

32 J. Harris, A. Griffin Phys. Rev. B3, 749 (1971)

33 P.M. Platzman, S.J. Buchsbaum Phys. Rev. 132, 2 (1963)

34 D. Wagner Z. Naturforsch. 21a, 634 (1966)

35 K.L. Kliewer, R. Fuchs Phys. Rev. 172, 607 (1968)

36 L.J.M. van de Klundert, E.A. Gijsbertse, L.C. van der Marel Phys. Lett. 40A, 373 (1972)

37 D.C. Mattis, G. Dresselhaus Phys. Rev. 111, 403 (1958)

38 D.C. Mattis, J. Bardeen Phys. Rev. 111, 412 (1958)

39 J. Bardeen, L.N. Cooper, I.R. Schrieffer Phys. Rev. 108, 1175 (1957)

40 A.P. van Gelder Phys. Rev. 187, 833 (1969)

41 A. Griffin, E. Zaremba Phys. Rev. A8, 486 (1973)

42 H.G. Weßjoham Z. Physik 269, 269 (1974)
G. Borstel Z. Naturforsch. 28a, 1055 (1973);
ibid 29a, 1306 (1974)

43 S.R. Seshadri Int. J. Electronics 25, 481 (1968)
V.I. Pakhomov, K.N. Stepanov
Sov. Physics Techn. Physics 12, 1011 (1968)
R.E. De Wammes, W.F. Hall Phys. Rev. Lett. 29, 172 (1972)
J.J. Quinn, K.W. Chiu in "Proceedings of the Taormina Conference on Polaritons" ed. E. Burstein
K.W. Chiu, J.J. Quinn Phys. Rev. B5, 4707 (1972);
Nuovo Cim. 10B, 1 (1972); Phys. Rev. Lett. 29, 600 (1972)

44 V.P. Silin, E.P. Fetisov Zh. Eksperim.i Teor. Fiz. 41, 159 (1961); Soviet Phys.-JETP 14, 115 (1962)

45 I.M. Gel'fand, G.E. Shilov "Generalized Functions" Bd. I - V New York, London 1964 - 1966

46 P.A. Fedders Phys. Rev. 153, 438 (1967)

47 J. Lindhard Mat. fys. Medd. dan. vid. Selsk. 28, Nr. 8 (1954)

48 Ch. Heger, D. Wagner Z. Physik 244, 449 (1971)

49 F. Forstmann Z. Physik 203, 495 (1967)

50 J.J. Brion, R.F. Wallis, A. Hartstein, E. Burstein Phys. Rev. Lett. 28, 1455 (1972)

51 A. Hartstein, E. Burstein Sol. State Comm. 14, 1223 (1974)

52 H. Ehrenreich, M.H. Cohen Phys. Rev. 115, 786 (1959)
J. Goldstone, K. Gottfried Nuovo Cimento 10 13, 849 (1959)

53 G.E.H. Reuter, E.H. Sondheimer
Proc. Roy. Soc. (London) 195, 136 (1948)

54 D.M. Newns Phys. Rev. B1, 3304 (1970)

55 A. Eguiluz, S.C. Ying, J.J. Quinn
Phys. Rev. B11, 2118 (1975)

56 M. Born, E. Wolff "Principles of Optics" 4th edition
Oxford et al. 1970

57 S. Methfessel "Dünne Schichten" Halle (Saale) 1953

58 W.M. Walsh, P.M. Platzman Phys. Rev. Lett 15, 784 (1965)

59 R.G. Chambers "Transport Properties: Surface and
Size Effects" in "The Physics of Metals" ed. by
J.M. Ziman Cambridge 1969

Lebenslauf

6. 8. 1943	geboren in Berlin
1949	Einschulung in die katholische Volksschule in Köln-Deutz
1953	Umschulung auf das humanistische Gymnasium in Köln-Mülheim
1962	Abitur
SS 1962	Beginn des Physikstudiums an der Universität Köln
SS 1965	Diplom-Vorprüfung
WS 1969/70	Diplom
WS 1970/71	Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für theoretische Physik III von Prof. Dr. D. Wagner an der RUB und Beginn der Dissertation
23. 6. 1972	Eheschließung mit Fräulein Angelika Grosse aus Berlin
1975	Beendigung der Dissertation